arXiv:2611.29992v1 [stat.ML] 23 Nov 2026

小波行列式采样器：适应正则性的最优逼近率

Hoang-Son Tran * Pranav Gupta †数学系 应用数学部 新加坡国立大学 布朗大学 transonsp97@gmail.com pranav_gupta@brown.edu

Subhro Ghosh 数学系 新加坡国立大学 subhrowork@gmail.com

摘要

我们在流形和几何图上构造了基于小波的行列式采样器，其逼近率能够适应观测函数的正则性。在维数为 m的黎曼流形上，对于 s-Hölder观测函数和 H^s 观测函数的线性统计量，我们的小波行列式点过程满足阶为$n^{1-2s/m}$ 的方差缩减，其中 $0 < s \leq 1$。利用这些采样器，我们进一步构造了无偏求积公式，其均方根误差为 $O(n^{-1/2-s/m})$，且至多使用 $3n/2$ 次函数求值，达到经典随机积分的最优指数。对于从m维流形采样得到的点云，我们在两类标准几何随机图上构造了相应的小波行列式采样器： ε-图和对称 k近邻图。这些采样器对 s-Hölder观测函数的线性统计量实现相同的方差缩减，并产生经验平均值的条件无偏估计量，其均方根误差为 $O(n^{-1/2-s/m})$，且至多使用 $2n$ 次函数求值。在这两种情形下，逼近率均由内在维数 m 和观测函数的正则性 s 决定。

1 引言

数值积分和机器学习中的许多问题都需要仅使用少量函数求值来近似一个积分或较大的经验平均。形式化地，设 μ 是空间 $\mathcal{X}$ 上的一个概率测度，并设 $\mathcal{F}$ 是一族可积的^函数 f: $\mathcal{X} \to \mathbb{R}$。对于 $f \in \mathcal{F}$，我们寻求 $\mathcal{I}(f)$ 的估计量 $\mathcal{I}_n(f)$: $= \int_{\mathcal{X}} f \mathrm{d}\mu$，且仅使用 n 次 f 的求值。示例包括数值求积、在随机梯度下降（SGD）中使用小批量进行梯度估计，以及构造能够一致近似一族目标函数的小型加权子集，这类子集称为核心集。对于平方可积观测函数，独立采样提供了一种简单且广泛适用的方法，其均方根误差（RMSE）为 $n^{-1/2}$ 阶。然而，这一一般速率并未利用观测函数的正则性或底层空间的几何

空间。一个自然的问题是，在相同的评估预算下，这些额外结构能否提高近似精度。

*通讯作者
†通讯作者

行列式点过程（DPPs） [9, 6, 8, 11]为这一问题 [7]提供了一种基于核的方法 [3, 1, 2, 14], 。其负相关性能够减少所选点之间的冗余，从而得到更准确的积分估计 [3, 1, 2, 14], ；同时，其代数结构使得人们可以通过线性统计量的方差研究波动。核设计发挥着核心作用：定量改进取决于抽样分布与所关注观测函数之间的相互作用。近期研究针对 DPP 核设计发展出了两种互补的方法：欧几里得空间中的小波行列式点过程利用观测函数的正则性，包括有限光滑性 [12]；基于扩散算子构建的谱行列式点过程则为流形、点云和网络提供了内在构造，其保证反映了底层几何 [13]。

在本文中，我们通过流形和几何图上的局部化谱构造，将这两种方法结合起来。谱小波和热核提供了局部化特征，我们据此构造定义 DPP 核的有限秩正交投影。核心挑战在于，从这些特征过渡到正交投影时，仍要保留足够的局部化性质。我们利用这种局部化性质，建立了能够适应观测函数正则性的方差缩减和逼近率。所得构造为连续与离散情形下的采样提供了一种统一方法，其逼近率由内在维数和正则性决定。

2 流形上的谱小波 DPP

设 $(\mathcal{M}, g)$ 是一个光滑、连通、闭的 $m \geq 1$ 维黎曼流形。令 $\mu := \mathrm{vol}_g / \mathrm{vol}_g(\mathcal{M})$，并记 d 为测地距离。对于函数 $f : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ 和 $0 < s \leq 1$，定义

$$[f]_{C^{0,s}} := \sup_{x \neq y} \frac{|f(x) - f(y)|}{d(x,y)^s}. \tag{1}$$

我们还定义

$$[f]_{H^s} := \begin{cases} \left(\iint_{\{x \neq y\}} \dfrac{|f(x) - f(y)|^2}{d(x,y)^{m+2s}} \, \mathrm{d}\mu(x) \, \mathrm{d}\mu(y) \right)^{1/2}, & 0 < s < 1, \\ \left(\displaystyle\int_{\mathcal{M}} |\nabla f|_g^2 \, \mathrm{d}\mu \right)^{1/2}, & s = 1, \end{cases} \tag{2}$$

其中，当 $s = 1$ 时，∇f 被理解为弱梯度。我们将具有有限半范数 (1) 的函数类记为 $C^{0,s}(\mathcal{M})$，并将 $L^2(\mu)$ 中具有有限半范数 (2) 的函数空间记为 $H^s(\mathcal{M})$。

设 $\Delta_{\mathcal{M}}$ 为拉普拉斯–贝尔特拉米算子，并令 $L := -\Delta_{\mathcal{M}}$。固定 $L^2(\mu)$ 的一组实标准正交特征基 $\{\phi_k\}_{k \geq 1}$，使得 $\phi_1 = 1$ 且

$$L\phi_k = \lambda_k \phi_k, \qquad 0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots.$$

谱滤波器*spectral filter* 是一个有界连续函数 $u : [0, \infty) \to \mathbb{R}$。下文中，我们考虑满足以下条件的滤波器 $u \in C^\infty([0, \infty))$：

$$\sup_{t \geq 0} (1 + t)^p |u^{(q)}(t)| < \infty \qquad \text{for all integers } p, q \geq 0. \tag{3}$$

对于这样的滤波器，算子 $u(h^2 L)$ 关于 μ 具有一个光滑积分核，其形式为

$$W_{u,h}(x, y) := \sum_{k=1}^{\infty} u(h^2 \lambda_k) \phi_k(x) \phi_k(y), \qquad h > 0.$$

对于每个固定的 $h > 0$，级数一致收敛。

注 2.1 （与谱小波的关系）。 对于满足 （3） 和u（0） $= 0$ 的非零滤波器 u ， 核 $W_{u,h}$ 是 M 上的谱小波，其含义见 *[4]*。

2.1 谱小波DPP与方差缩减

固定一个局部化尺度 $h > 0$、有限个中心 $\mathcal{Z} = \{z_1, \dots, z_I\} \subset \mathcal{M}$，以及一个有限的谱滤波器族 $\mathcal{U} = \{u_1, \dots, u_J\}$，满足 (3)。定义

$$\psi_{i,j}(x) := h^{m/2} W_{u_j,h}(x, z_i), \qquad 1 \le i \le I, \quad 1 \le j \le J,$$

and

$$H_h := \operatorname{span}\{\psi_{i,j} : 1 \le i \le I,\ 1 \le j \le J\} \subset L^2(\mu).$$

令 Π_h 表示从 $L^2(\mu)$ 到 H_h 的正交投影，并将其相对于 μ 的积分核记为 K_h，于是

$$\Pi_h f(x) = \int_{\mathcal{M}} K_h(x, y) f(y)\, \mathrm{d}\mu(y).$$

由于 Π_h 是有限秩正交投影，(K_h, μ) 定义了一个 DPP，且几乎必然恰有 $n_h := \dim H_h$ 个点。

定义 2.1. 具有核 K_h 和参考测度 μ 的 *DPP* S_h 称为在局部化尺度 h 下与 (Z, U) 相关联的谱小波DPP 。

我们的主要结果给出了线性统计量方差的界定

$$\mathcal{S}_h(f) := \sum_{x \in \mathcal{S}_h} f(x).$$

中心的选择通过以下分离条件指定。

定义2.2 （分离中心点）。 设 $r > 0$。集合 $Z = \{z_1, \dots, z_I\} \subset M$ 是 r-分离的，如果当 $i \neq j$ 时，$d(z_i, z_j) > r$ 。如果它是 r-分离的，且不存在严格包含它的 r-分离集，则称其为极大 r-分离集。

现在我们可以陈述主要定理:

定理2.1 （谱小波DPP的方差缩减）。 固定一个有限的实谱滤波器族 $U = \{u_1, \dots, u_J\}$，满足（3），且至少有一个非零 u_j。存在$a_0 = a_0$（M g、U） ≥ 1，使得对于每个固定的 $a \ge a_0$，存在 $h_0 = h_0$（M g、U a） > 0，具有以下性质。

对于 $0 < h \le h_0$，令 $Z = \{z_1, \dots, z_I\}$ 为任意极大 ah-分离集，并令 S_h 为与（Z、U）关联的谱小波*DPP*，尺度为 h。则 $n_h \asymp h^{-m}$。此外，对于每个 $0 < s \le 1$,

$$\operatorname{Var}[\mathcal{S}_h(f)] \lesssim \begin{cases} n_h^{1-2s/m} [f]^2_{C^{0,s}}, & f \in C^{0,s}(\mathcal{M}), \\ n_h^{1-2s/m} [f]^2_{H^s}, & f \in H^s(\mathcal{M}). \end{cases}$$

隐含常数仅取决于(M g)、U、 a和 s。

2.2 求积的应用

L且 f 属于 $C^{0,s}(\mathcal{M})$或 $H^s(\mathcal{M})$之一，其中 $0 < s \le 1$。我们旨在近似

$$\mathcal{I}(f) := \int_{\mathcal{M}} f(x)\,\mathrm{d}\mu(x).$$

我们的求积公式使用与滤波器 $\mathcal{U} = \{u_1, u_2\}$相关的谱小波DPP，其中

$$u_1(t) = e^{-t} - e^{-2t}, \qquad u_2(t) = e^{-2t} - e^{-4t} = u_1(2t). \tag{4}$$

对于这一固定对，我们将证明，定理 2.1 中的常数 $a_0 = a_0(\mathcal{M}\ g)$ 和 $h_0 = h_0(\mathcal{M}\ g, a)$ 可以选取为使得

$$cn_h \le K_h(x,x) \le Cn_h, \qquad x \in \mathcal{M},$$

对于任意最大 ah-分离集，只要 $a \ge a_0$ 且 $0 < h \le h_0$，均有此结论。这里， $c, C > 0$仅依赖于 $(\mathcal{M}\ g)$ 和 a。该估计将在下文定理 2.2 的证明中建立，并确保求积权重定义良好。

在此范围内固定 a 和 h，并令 $\mathcal{Z} = \{z_1, \dots, z_I\}$ 为最大 ah-分离集。令 $V_1, \dots, V_I$为其可测的测地 Voronoi 胞，并将并列情形分配给最小索引。定义 $\iota : \mathcal{M} \to \{1, \dots, I\}$：当 $x \in V_i$ 时令其等于 $\iota(x)$，并令 $\mathcal{S}_h$ 为在尺度 h 下与 $(\mathcal{Z}, \mathcal{U})$ 相关的谱小波 DPP。

对于 $f \in C^{0,\,s}(\mathcal{M})$，定义

$$\widehat{\mathcal{I}}_h(f) := \sum_{i=1}^{I} \mu(V_i) f(z_i) + \sum_{x \in \mathcal{S}_h} \frac{f(x) - f(z_{\iota(x)})}{K_h(x,x)}. \tag{5}$$

对于 $f \in H^s(\mathcal{M})$，在有限个点 $z_1, \dots, z_I$处对 f求值并无意义。我们按如下方式修改估计量。令 $U_1, \dots, U_I$相互独立，且也与 $\mathcal{S}_h$独立，其中 $U_i \sim \mu(V_i)^{-1}\mu|_{V_i}$。使用 f 的任意可测代表元，定义

$$\widehat{\mathcal{I}}_h(f) := \sum_{i=1}^{I} \mu(V_i) f(U_i) + \sum_{x \in \mathcal{S}_h} \frac{f(x) - f(U_{\iota(x)})}{K_h(x,x)}. \tag{6}$$

如果在一个 μ-零测集上修改 f，这些随机求值几乎必然不变。

定理 2.2 (用于求积的谱小波DPP)。 设 $\mathcal{U} = \{u_1, u_2\}$ 为式 (4) 中的滤波器。固定如上所述的 $a \ge a_0(\mathcal{M}\ g)$ 和 $0 < h \le h_0(\mathcal{M}\ g, a)$。令 $\mathcal{Z}$ 为任意极大 ah-分离集，令 $\mathcal{S}_h$ 为尺度h下与 $(\mathcal{Z}, \mathcal{U})$ 相关联的谱小波*DPP*。那么，对于每个 $0 < s \le 1$ 以及每个 $f \in C^{0,\,s}(\mathcal{M})$ 或 $f \in H^s(\mathcal{M})$，式 (5) 或 (6) 中的相应估计量均为无偏：

$$\mathbb{E}\big[\widehat{\mathcal{I}}_h(f)\big] = \mathcal{I}(f).$$

此外，

$$\mathbb{E}\left|\widehat{\mathcal{I}}_h(f) - \mathcal{I}(f)\right|^2 \lesssim \begin{cases} n_h^{-1-2s/m}[f]^2_{C^{0,s}}, & f \in C^{0,s}(\mathcal{M}), \\ n_h^{-1-2s/m}[f]^2_{H^s}, & f \in H^s(\mathcal{M}). \end{cases}$$

隐含常数仅取决于 $(\mathcal{M}\ g)$、 a 和 s。特别是，它们对h、中心集合 $\mathcal{Z}$ 和 f均一致。

我们简要讨论这些估计量所需的函数求值次数。在定理 2.2 的证明中，我们将证明 $n_h = 2I$。因此，每个估计量至多需要对 f 求值 $n_h + I = 3n_h/2$ 次：在每个 DPP 点处求值一次，在每个中心z_i 或辅助点 U_i处求值一次。定理 2.2 的证明还给出了$K_h(x,\ x)$ 的显式表达式，其中明确了式 (5) 和 (6) 中的权重。

注 2.2 (求积收敛率的最优性)。 有趣的是，我们的估计量在具有 $0 < s \leq 1$ 的索列夫函数类 H^s 上达到了最优收敛率。事实上，在 m 维欧几里得立方体上进行经典随机求积时，H^s 单位球上的最优均方根误差（*RMSE*）为 $n^{-1/2-s/m}$，其中 n 是函数求值的次数。我们的估计量在闭黎曼流形上达到了相同的收敛率：定理 *2.2* 给出了阶为 $n_h^{-1/2-s/m}$ 的均方根误差，且最多只需进行 $3n_h/2$ 次函数求值。

3 几何图上的谱小波 DPP

设 $(\mathcal{M}\ g)$ 是一个固定的、光滑、紧致且连通的无边界黎曼流形，其维数为 $m \geq 1$，并等距嵌入于 $\mathbb{R}^d$ 中。我们将 $\mathcal{M}$ 与其像等同，并取 $N \geq 2$。令 $d_{\mathcal{M}}$ 为其测地距离，令 $\mu = \mathrm{vol}_g\ /\ \mathrm{vol}_g(\mathcal{M})$ 为归一化体积形式。对于 $N \geq 2$，我们考虑数据集 $\mathcal{X}:=\{X_1、\ \cdots\ X_N\} \subset \mathcal{M}$，其中

$$x_1, \ldots, x_N \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} \nu = \rho\mu,\ \text{where } 0 < \rho_{\min} \leq \rho \leq \rho_{\max} < \infty\ \ \mu\text{-a.s.} \tag{7}$$

特别地，这些点几乎必然互不相同。我们赋予$\mathcal{X}$经验测度$\mu_N = N^{-1}\sum_i \delta_{x_i}$ 以及内积

$$\langle u, v\rangle_{L^2(\mu_N)} := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} u(x_i)v(x_i). \tag{8}$$

取$\mathcal{X}$ 为顶点集，我们考虑以下两种随机图构造，其中边的集合由邻接矩阵 A完全刻画：

ε-图： 对于 $\varepsilon > 0$，定义

$$A_{i,j} = A^{\varepsilon}_{ij} := \mathbf{1}_{\{|x_i - x_j| \leq \varepsilon\}},\quad 1 \leq i, j \leq N. \tag{9}$$

对称 k-近邻图： 令 $1 \leq k < N$。对于每个 i，令$\mathcal{N}_k(i)$表示除去 x_i后，x_i 的 k个最近顶点的集合，并按照标签顺序解决并列情形。令 R_i 为到第 k个最近的其他顶点的环境欧几里得距离。定义

$$A_{ij} = A^{k}_{ij} := \begin{cases} 1, & i = j,\ \text{or } j \in \mathcal{N}_k(i),\ \text{or } i \in \mathcal{N}_k(j), \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{10}$$

对于任一种构造，我们设

$$r := \begin{cases} \varepsilon, & A = A^{\varepsilon}, \\ (k/N)^{1/m}, & A = A^{k}, \end{cases} \quad K := Nr^m,\quad d_i := \sum_j A_{ij},\quad D := \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_N). \tag{11}$$

最后，我们定义缩放后的对称归一化图拉普拉斯算子及其对应的热半群如下：

$$\mathcal{L}_N := r^{-2}(I - D^{-1/2}AD^{-1/2}),\qquad T_t := e^{-t\mathcal{L}_N},\quad t \geq 0. \tag{12}$$

矩阵 $\mathcal{L}_N$ 是半正定的，并且相对于内积（8）是自伴的。

为研究热半群的空间局部化，我们为图配备最短路径距离。我们为每条边 $\{i,j\}$ 赋予 $i \neq j$ 长度 $|x_i - x_j|$，并将所得的最短路径距离记为 $d_N(i,j)$；按照约定，若 i和 j 属于不同的连通分量，则 $d_N(i,j) = \infty$ 。我们记

$$B_N(i,R) := \{j : d_N(i,j) \le R\}$$

fo相应的闭球为 r。注意，根据 $\mathbb{R}^d$中的三角不等式，我们有 e

$$|x_i - x_j| \le d_N(i,j). \tag{13}$$

注 3.1 (常数约定**)**。 在全文中，$(M\ g)$、其嵌入$\rho_{\min}$以及 $\rho_{\max}$ 均为固定对象。我们称一个常数为结构常数，如果它仅依赖于这些数据。特别地， ρ 的连续模不包含在此约定中。记号$a \lesssim b$ 表示，对于某个结构常数 $C > 0$，有 $a \le Cb$ ； 而 $a \asymp b$ 表示同时有 $a \lesssim b$ 和 $b \lesssim a$。对固定参数的额外依赖以下标表示。常数可能在不同的公式中发生变化。

3.1 基于热核列的行列式过程

现在，我们通过适当选取热半群的列，在任一图上构造一个行列式点过程。固定 $a \ge 1$ 和 $h > 0$，令 $Z = \{z_1、\ldots\ldots、z_n\}$ 为相对于 d_N 的顶点集合中最大的严格 ah-分离集。可以通过贪心算法构造这样的集合：按标签顺序递增考察各顶点，并保留那些与所有先前选定顶点的距离均大于 ah 的顶点。根据最大 ah-分离集的定义，必有

$$d_N(z_\ell, z_j) > ah \quad \forall \ell \neq j, \text{ and } \min_{1 \le \ell \le n} d_N(i, z_\ell) \le ah \quad \forall 1 \le i \le N. \tag{14}$$

令 e_i 表示 $\mathbb{R}^N$ 中的第 i 个坐标向量。我们考虑与所选顶点 Z 相对应的热核列，并定义

$$E_Z := (e_{z_1}, \ldots, e_{z_n}), \quad B_h := T_{h^2} E_Z, \quad \Pi_h := B_h (B_h^* B_h)^{-1} B_h^*. \tag{15}$$

由于 T_{h^2} 可逆， B_h 的列线性无关，因此 Π_h 是投影到这些列张成空间上的秩为 n 的正交投影。此外，根据半群性质，

$$B_h^* B_h = E_Z^* T_{2h^2} E_Z. \tag{16}$$

Π_h 关于经验测度 μ_N 的积分核为

$$\mathcal{K}_{h,N}(x_i, x_j) := N(\Pi_h)_{ij}. \tag{17}$$

给定$\mathcal{X}$，令$\mathcal{S}_{h、N}$ 为具有相关 Π_h 的投影行列式点过程。因此，$\mathcal{S}_{h、N}$ 是{1、.....、 N} 的一个随机子集，其基数为 n，分布为

$$\mathbb{P}(\mathcal{S}_{h,N} = J \mid \mathcal{X}) = \det((\Pi_h)_{J,J}), \quad J \subset \{1, \ldots, N\}, \quad |J| = n. \tag{18}$$

对于每个顶点 i，我们将其包含概率记为

$$\pi_i := \mathbb{P}(i \in \mathcal{S}_{h,N} \mid \mathcal{X}) = (\Pi_h)_{ii}.$$

给定函数 $f:\mathcal{X} \to \mathbb{R}$，我们考虑与之相关的线性统计量

$$\mathcal{S}_{h,N}(f) := \sum_{i \in \mathcal{S}_{h,N}} f(x_i). \tag{19}$$

注意，$\mathcal{K}_{h,N}(x_i, x_i) = N\pi_i$。
接下来，对于 $0 < s \leq 1$ 和 $f: \mathcal{X} \to \mathbb{R}$，我们定义

$$[f]_{s,\mathcal{X}} := \max_{i \neq j} \frac{|f(x_i) - f(x_j)|}{|x_i - x_j|^s}. \tag{20}$$

下面的估计对所有满足 (20) 的函数同时成立。特别地，它们适用于 $f: \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ 上满足以下条件的限制

$$[f]_{s,\mathcal{M}} := \sup_{x \neq y \in \mathcal{M}} \frac{|f(x) - f(y)|}{|x - y|^s} < \infty. \tag{21}$$

3.2 体积与热核估计

现在，我们建立分析上述构造的投影Π_h 所需的几何与热核估计。我们证明，以高概率，两个图构造的度都一致受控，图距离与$\mathcal{M}$上的测地距离可比，并且图距离球满足适当的体积界。在同一事件上，我们还得到热半群的非对角衰减估计，以及对角下界和近对角下界。以下两个定理分别精确表述了这些估计对 ε-图和对称的 k近邻图成立的情形。

定理 3.1。 假设(7)成立，且令 $A = A^\varepsilon$ 属于(12)。存在正常数结构常数 r_0、 R_0、 C_δ、 c、 C，使得以下结论成立：
假设

$$0 < \varepsilon \leq r_0, \ and \ K = N\varepsilon^m \geq C \log N. \tag{22}$$

那么，存在一个事件 G_N^ε，其发生概率为

$$\mathbb{P}(\mathcal{G}_N^\varepsilon) \geq 1 - CNe^{-cK} \tag{23}$$

在该事件上，图是连通的，并且

$$c\, d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j) \leq d_N(i,j) \leq C\, d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j) \ i.e \ d_i \asymp K, \tag{24}$$

$$\mu_N(B_N(i,R)) \leq C(R + \delta_N)^m \quad for \ \delta_N := C_\delta \varepsilon \ and \ \forall R > 0, , \tag{25}$$

$$\mu_N(B_N(i,R)) \geq cR^m \quad for \ \delta_N \leq R \leq R_0. \tag{26}$$

此外，对于任意固定的 $A_0 > 0$ 和 $a \geq 1$，存在正数常数 C_*、 h_0、 C_{A_0}、 c_a，它们仅依赖于 A_0 、 a 和结构数据，使得在事件 G_N^ε 上，

$$0 \leq (T_\tau)_{ij} \leq \frac{C_{A_0}}{Nh^m} \left(1 + \frac{d_N(i,j)}{h}\right)^{-A_0}, \quad \forall \tau \in \{h^2, 2h^2\}, \tag{27}$$

$$(T_{2h^2})_{ii} \geq \frac{c}{Nh^m}, \tag{28}$$

$$(T_{h^2})_{ij} \geq \frac{c_a}{Nh^m}, \quad \forall i,j \ with \ d_N(i,j) \leq ah, \tag{29}$$

对所有满足条件的 h，以下结论同时成立

$$C_*\varepsilon^2 \log(eK) \leq h^2 \leq h_0^2. \tag{30}$$

此外，可以选择常数，使得 $h \geq \delta_N$、 $ah \geq 2\delta_N$ 和 $ah \leq R_0$。(27) 中的常数不依赖于 a；(30) 中的下界可能依赖于 a。

定理 3.2. 假设 (7)成立，且令 $A = A^k$ 属于 (12)。那么，存在正的结构常数 r_0、c、C，使得若

$$C \log N \le k < N, \quad r = (k/N)^{1/m} \le r_0, \tag{31}$$

那么存在一个事件 G_N^k，满足

$$\mathbb{P}(\mathcal{G}_N^k) \ge 1 - CNe^{-ck} \tag{32}$$

在该事件上，(24)–(29) 以概率 $K = k$、$\delta_N = C_\delta r$ 成立，并且

$$C_* r^2 \log(ek) \le h^2 \le h_0^2. \tag{33}$$

这些常数的依赖关系与定理 *3.1* 中相同。

此外，我们将在推论 3.4 中给出参数的明确取值，使得区间 (30) 和 (33) 非空。

3.3 几何图上的方差缩减

定理 3.3。 固定 $B > m + 2$ 和 $A_0 > B + m$。存在一个充分大的 $a \ge 1$，它仅依赖于 A_0、B 和结构数据，使得以下结论成立：

对于任一种图构造，令 Z 和 Π_h 由(14)–(15) 定义，其中采用此处的a。在相应事件 G_N^ε 或 G_N^k上，对于每个满足(30) 或(33)的 h （分别对应），我们有

$$n \asymp h^{-m}, \tag{34}$$

$$|(\Pi_h)_{ij}| \le \frac{C}{Nh^m} \left(1 + \frac{d_N(i,j)}{h}\right)^{-B}, \tag{35}$$

$$c\frac{n}{N} \le \pi_i \le C\frac{n}{N}, \quad 1 \le i \le N. \tag{36}$$

此外，对于每个 $0 < s \le 1$ 以及每个满足: $X \to \mathbb{R}$的 f，相应的线性统计量满足

$$\frac{1}{n^2} \operatorname{Var}[\mathcal{S}_{h,N}(f) \mid \mathcal{X}] \le C_s [f]_{s,\mathcal{X}}^2 n^{-1-2s/m}. \tag{37}$$

这些常数取决于 A_0、B、s和结构数据，但与 N、h及 X 无关。

注 3.2. 在构造(15)中，热尺度 h是预先指定的，而秩$n = |Z|$ 由最大 ah-分离集的选取决定，并且可能取决于 X 的实现。尽管如此，(34) 仍在所述事件上对秩提供一致控制。特别地，我们不要求通过改变h就能达到每一个预先指定的秩。

推论 3.4。 固定 $q > 0$。存在常数 K_0、$C_* > 0$ 和 $N_0 \in \mathbb{N}$，它们仅取决于 q 以及定理 *3.3* 的固定数据，使得对于每个 $N \ge N_0$，以下选择均为可采纳的：

$$\varepsilon_N := \left(\frac{K_0 \log N}{N}\right)^{1/m}, \quad h_N := \varepsilon_N \sqrt{C_* \log(eK_0 \log N)}, \tag{38}$$

$$k_N := \lceil K_0 \log N \rceil, \quad h_N := \left(\frac{k_N}{N}\right)^{1/m} \sqrt{C_* \log(ek_N)}. \tag{39}$$

对于 ε-图和对称 k-近邻图，以上相应的选择分别确保以至少 $1-N^{-q}$ 的概率，结论 (34)–(37)成立，其中

$$n \asymp_q \frac{N}{\log N(\log\log N)^{m/2}}. \tag{40}$$

估计式 (34)–(37) 对任意 $h_N \le h \le h_0$ 均成立，且相应的秩满足 $n \asymp h^{-m}$。

3.4 经验平均的无偏估计量

方差估计 (37) 涉及线性统计量 $\mathcal{S}_{h,N}(f)$，其归一化版本未必是经验平均的无偏估计量，因为纳入概率π_i 不一定是常数。现在，我们构造一个条件无偏估计量，它能达到相同的方差衰减速率，同时所需的函数求值次数不超过 $2n$。

我们的估计量基于一个控制变量，该控制变量由 f 的分段常数近似得到。为构造此近似，我们根据 d_N，将每个顶点分配给 Z 中最近的中心 z_ℓ；若出现并列情形，则按中心的顺序处理。由此得到顶点集的一个划分$C_1,\dots,C_n$。然后我们定义

$$\begin{aligned} A_h f(x_i) &:= f(x_{z_\ell}), \quad i \in C_\ell, \\ I_N(A_h f) &:= \sum_{\ell=1}^{n} \frac{|C_\ell|}{N} f(x_{z_\ell}). \end{aligned} \tag{41}$$

利用此近似作为控制变量，我们定义估计量

$$\widehat{I}_{h,N}(f) := I_N(A_h f) + \frac{1}{N} \sum_{i \in \mathcal{S}_{h,N}} \frac{f(x_i) - A_h f(x_i)}{\pi_i}. \tag{42}$$

该估计量所需的 $2n$ 次 f 求值至多如此，因为同时属于中心集和行列式点过程样本的顶点，其函数值可以重复利用。

定理 3.5。 在定理 *3.3* 的假设下，对于相应的高概率^事件，估计量 $I_{h,N}(f)$ 是 $I_N(f)$的条件无偏估计量。更准确地说，对于每个$0 < s \le 1$ 以及每个 $f : X \to \mathbb{R}$，我们有

$$\mathbb{E}[\widehat{I}_{h,N}(f) \mid \mathcal{X}] = I_N(f), \tag{43}$$

$$\mathbb{E}[|\widehat{I}_{h,N}(f) - I_N(f)|^2 \mid \mathcal{X}] \le C_s [f]_{s,\mathcal{X}}^2 n^{-1-2s/m}. \tag{44}$$

该估计量至多需要对 f 进行 $2n$ 次求值。特别地，对于推论 *3.4* 中图参数的任一种选择，这些结论成立的概率至少为 $1-N^{-q}$。

命题 3.6。 设 $f : M \to \mathbb{R}$ 有界、可测，且独立于^ ^点云固定。假设 I_N平方可积，并且几乎处处满足 $\mathbb{E}[I_N \mid X] = I_N(f)$。那么

$$\mathbb{E}\left[\left|\widehat{I}_N - \int_{\mathcal{M}} f \,\mathrm{d}\nu\right|^2\right] = \mathbb{E}\big[\operatorname{Var}(\widehat{I}_N \mid \mathcal{X})\big] + \frac{\operatorname{Var}_\nu(f)}{N}. \tag{45}$$

因此，(44) 估计了对观测点云进行子采样所产生的额外误差。$\int_{\mathcal{M}} f \,\mathrm{d}\nu$ 的近似还包括 (45) 中的第二项。定理 3.5 中的事件涉及在条件下对第一项的控制；若要得到无条件界定，还需要控制其补集。

3.5 中心极限定理

^接下来，对于 $\mathcal{M}$ 上的一个固定函数，我们考察 $\mathcal{S}_{h,N}(f)$ 和 $I_{h,N}(f)$ 的条件分布。对于非恒定的 $f \in C^1(\mathcal{M})$，我们证明这两个统计量均满足匹配的方差下界和中心极限定理。这些极限在点云的几乎每个实现条件下均成立。

记

$$V_{h,N}(f) := \mathrm{Var}[\mathcal{S}_{h,N}(f) \mid \mathcal{X}], \qquad W_{h,N}(f) := \mathrm{Var}[\widehat{I}_{h,N}(f) \mid \mathcal{X}], \tag{46}$$

并令 Φ 表示 $\mathcal{N}(0,1)$ 的分布函数。

定理 3.7。 固定 $q > 1$，并在推论 *3.4* 中的图参数下任选一种图构造。定理 *3.3* 中存在一个足够大的固定选择 a，它仅依赖于 A_0、B 和结构数据，使得以下结论成立。针对该 a 值，选择 C_*、h_0，并令 $h = h(N)$ 为满足 (30) 或 (33)（分别对应）的确定性序列，其中 $h(N) \to 0$。

令 $f \in C^1(M)$ 为非恒定函数，且固定不随点云变化。对于 (7) 中无限独立同分布序列的几乎每个实现，以及所有充分大的 N，

$$\frac{V_{h,N}(f)}{n^2} \asymp_f W_{h,N}(f) \asymp_f \frac{h^2}{n} \asymp_f n^{-1-2/m}. \tag{47}$$

此外，对于每个 $t \in \mathbb{R}$，几乎必然有，

$$\mathbb{P}\left(\frac{\mathcal{S}_{h,N}(f) - \sum_{i=1}^N \pi_i f(x_i)}{\sqrt{V_{h,N}(f)}} \le t \,\middle|\, \mathcal{X} \right) \longrightarrow \Phi(t), \tag{48}$$

$$\mathbb{P}\left(\frac{\widehat{I}_{h,N}(f) - I_N(f)}{\sqrt{W_{h,N}(f)}} \le t \,\middle|\, \mathcal{X} \right) \longrightarrow \Phi(t). \tag{49}$$

式(47) 中的常数可能依赖于 f 和固定参数，但不依赖于 N、 h或实际得到的点云。

结论对任意维数 $m \ge 1$都成立。特别地，它们适用于推论 3.4 中的热尺度。式（48）也是 $n^{-1}\mathcal{S}_{h,\ N}(f)$的中心极限定理，其中心为 $n^{-1}\sum_i \pi_i f(x_i)$。这个条件均值不一定等于 $I_N(f)$，而根据（43），式（49）的中心为 $I_N(f)$。

4 几何图上的 Haar DPP

接下来，我们考虑由分块投影构造的行列式点过程，这些投影作用于顶点集划分的归一化示性函数。这些示性函数恰好是相应的图 Haar 尺度函数。

令$\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathcal{M}$。我们首先考虑顶点集的一个划分 $C_1, \dots, C_n$。在第 4.2 小节中，我们将给出一种利用 d_N构造此类划分的显式方法，该方法适用于任意数据集。在条件（7）下，我们进而为所得单元的基数和直径建立界。

4.1 与划分相关联的投影

设 $C_1, \dots, C_n$ 是将 $\{1, \dots, N\}$ 划分为非空集合的划分，该划分由 $\mathcal{X}$ 唯一确定。对于 $1 \le \ell \le n$，记作

$$M_\ell := |C_\ell|, \quad w_\ell := \frac{M_\ell}{N}, \quad \Delta_\ell := \max_{i,j \in C_\ell} d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j). \tag{50}$$

向量 $\phi_\ell := M_\ell^{-1/2}\mathbf{1}_{C_\ell}$ 在 $\mathbb{R}^N$ 中关于其欧几里得内积是正交归一的，它们张成空间上的正交投影为

$$P_{\mathrm{sc}} := \sum_{\ell=1}^{n} \phi_\ell \phi_\ell^*, \qquad (P_{\mathrm{sc}})_{ij} = \begin{cases} M_\ell^{-1}, & i,j \in C_\ell, \\ 0, & i,j \text{ in distinct sets.} \end{cases} \tag{51}$$

因此， P_{sc} 的秩为 n，其相对于 μ_N 的积分核在 $(x_i,\ x_j)$ 处的取值为 $N(P_{\mathrm{sc}})_{ij}$。

给定 $\mathcal{X}$，令 $\mathcal{S}_{\mathrm{bl}}$ 为投影为 P_{sc} 的 DPP。对于 $|J| = n$，其选取 J 的条件概率为 $\det((P_{\mathrm{sc}})_{J,J})$。

命题 4.1。集合 $\mathcal{S}_{\mathrm{bl}}$ 恰好包含来自每个 C_ℓ 的一个顶点 U_ℓ。给定 $\mathcal{X}$，变量 U_1、……、U_n 相互独立，且 U_ℓ 在 C_ℓ 上服从均匀分布。特别地，

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(U_1 = u_1, \dots, U_n = u_n \mid \mathcal{X}) &= \prod_{\ell=1}^{n} M_\ell^{-1} \quad (u_\ell \in C_\ell), \\ \pi_i := \mathbb{P}(i \in \mathcal{S}_{\mathrm{bl}} \mid \mathcal{X}) &= M_\ell^{-1} \qquad (i \in C_\ell). \end{aligned} \tag{52}$$

如果每条 M_ℓ 都是偶数，则将 $C_\ell = C_\ell^+ \sqcup C_\ell^-$ 划分为两个大小为 $M_\ell/2$ 的集合。*Haar* 细节函数 $\psi_\ell := M_\ell^{-1/2}(\mathbf{1}_{C_\ell^+} - \mathbf{1}_{C_\ell^-})$ 给出第二个投影 $P_{\mathrm{H}} := \sum_{\ell=1}^{n} \psi_\ell \psi_\ell^*$。其 *DPP* 也满足 (52)。

4.2 在几何图上构造划分

现在，我们为 ε-图 (9) 和对称的 k 近邻图 (10) 构造顶点集划分，其中边长为 $|x_i - x_j|$，最短路径距离为 d_N。

我们首先选取一组中心。固定 $h > 0$，并按标签顺序检查各顶点，保留与所有先前保留顶点的距离均大于 h 的顶点。将按顺序保留的顶点记为 $z_1, \dots, z_n$。于是

$$d_N(z_\ell, z_j) > h \quad (\ell \neq j), \qquad \min_{1 \le \ell \le n} d_N(i, z_\ell) \le h \quad (1 \le i \le N). \tag{53}$$

我们可以用两种方式构造划分：首次覆盖划分和 *Voronoi* 划分。对于首次覆盖划分，将 i 分配给满足 $i \in B_N(z_\ell, h)$ 的最小 ℓ。对于 Voronoi 划分，将 i 分配给 d_N 中距离其最近的 z_ℓ；若出现并列，则选择最小的 ℓ。在这两种情况下，$z_\ell \in C_\ell \subseteq B_N(z_\ell, h)$。特别地，当 $d_N(i,j) > 2h$ 时，$(P_{\mathrm{sc}})_{ij} = 0$。

令 ℓ_0 和 κ_0 如 (101) 中所示，因此只要 $|x-y| \le \ell_0$，就有 $d_{\mathcal{M}}(x,y) \le \kappa_0 |x-y|$。使用定理 3.1 中的 C_δ 和 R_0，其中 R_0 是 (26) 中的上半径。

定理 4.2。假设 (7)。固定 $q > 0$。存在常数 K_0、$K_1 > 0$ 和 N_0，它们仅取决于 q 和结构数据；并且存在结构常数 $c_* \in (0,1)$，使得以下性质成立。令

$$t_N := \left(\frac{K_0 \log N}{N} \right)^{1/m}. \tag{54}$$

对于 $N \ge N_0$，存在一个概率至少为 $1 - N^{-q}$ 的事件 Γ_N，在该事件上，以下结论对同时成立

$$t_N \le \varepsilon \le \ell_0 \quad \textit{in } (9), \qquad K_1 \log N \le k \le c_* N \quad \textit{in } (10). \tag{55}$$

对于每个 $2C_\delta t_N \le h \le R_0$，两个划分均满足

$$n \asymp h^{-m}, \quad \Delta_\ell \le 2\kappa_0 h, \quad w_\ell \le \frac{C}{n} \quad (1 \le \ell \le n). \tag{56}$$

对于 *Voronoi* 划分，我们还有 $w_\ell \ge c/n$ 对每个 ℓ 都成立，因此 $\pi_i \asymp n/N$ 对每个 i 都成立。

4.3 线性统计量的方差

对于 $f \in C^{0,s}(\mathcal{M})$，定义

$$\mathcal{S}_{\mathrm{bl}}(f) := \sum_{i \in \mathcal{S}_{\mathrm{bl}}} f(x_i) = \sum_{\ell=1}^{n} f(x_{U_\ell}), \qquad \bar{f}_\ell := \frac{1}{M_\ell} \sum_{i \in C_\ell} f(x_i).$$

定理 4.3。对于 (50) 中的每个划分，$\mathbb{E}[\mathcal{S}_{\mathrm{bl}}(f) \mid X] = \sum_{\ell=1}^{n} f_\ell$ 以及

$$\mathrm{Var}[\mathcal{S}_{\mathrm{bl}}(f) \mid \mathcal{X}] = \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^{n} \frac{1}{M_\ell^2} \sum_{i,j \in C_\ell} |f(x_i) - f(x_j)|^2 \tag{57}$$

$$\leq \frac{1}{2} [f]_{C^{0,s}}^2 \sum_{\ell=1}^{n} \Delta_\ell^{2s}, \tag{58}$$

where $Delta_\ell$ 定义于 (50) 中。特别地，在 Γ_N 上，对于定理 *4.* *2,*

$$\frac{1}{n^2} \mathrm{Var}[\mathcal{S}_{\mathrm{bl}}(f) \mid \mathcal{X}] \leq C_s [f]_{C^{0,s}}^2 n^{-1-2s/m}, \qquad 0 < s \leq 1, \quad f \in C^{0,s}(\mathcal{M}). \tag{59}$$

4.4 经验平均的无偏估计

根据 (52)，$n^{-1}\mathcal{S}_{\mathrm{bl}}(f)$ 的条件均值为 $n^{-1} \sum_{\ell=1}^{n} \bar{f}_\ell$。另一方面，经验平均为

$$I_N(f) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i) = \sum_{\ell=1}^{n} w_\ell \bar{f}_\ell.$$

这两个表达式中的权重仅当单元 C_ℓ 具有相等基数时才一致。因此，为了在不作此限制的情况下获得条件无偏的估计量，我们定义

$$\widehat{I}_{\mathrm{bl}}(f) := \sum_{\ell=1}^{n} w_\ell f(x_{U_\ell}) = \frac{1}{N} \sum_{i \in \mathcal{S}_{\mathrm{bl}}} \frac{f(x_i)}{\pi_i}. \tag{60}$$

该估计量恰好需要对 f 进行 n 次求值。

定理 4.4. 对于 (50) 中的任意划分，$\mathbb{E}[I_{\mathrm{bl}}(f) \mid X] = I_N(f)$ 以及

$$\mathbb{E}[|\widehat{I}_{\mathrm{bl}}(f) - I_N(f)|^2 \mid \mathcal{X}] = \frac{1}{2N^2} \sum_{\ell=1}^{n} \sum_{i,j \in C_\ell} |f(x_i) - f(x_j)|^2 \tag{61}$$

$$\leq \frac{1}{2} [f]_{C^{0,s}}^2 \sum_{\ell=1}^{n} w_\ell^2 \Delta_\ell^{2s}. \tag{62}$$

特别地，在 Γ_N 上，对于定理 *4.2* 中的任一种划分，

$$\mathbb{E}[|\widehat{I}_{\mathrm{bl}}(f) - I_N(f)|^2 \mid \mathcal{X}] \leq C_s [f]_{C^{0,s}}^2 n^{-1-2s/m}, \qquad f \in C^{0,s}(\mathcal{M}), \quad 0 < s \leq 1. \tag{63}$$

对于固定点云的任意划分 $C_1, \ldots, C_n$，界定 (58) 和 (62) 均成立。特别地，若 $\max_\ell \Delta_\ell \leq b n^{-1/m}$，则 (59) 成立。此外，若 $\max_\ell w_\ell \leq B/n$，则 (63) 中的 $C_s = B b^{2s}/2$ 成立。

接下来，我们利用 (45) 来界定 $I_{\mathrm{bl}}(f)$ 作为 $\int_{\mathcal{M}} f \, \mathrm{d}\nu$ 的估计量时的误差。

推论 4.5。在定理 *4.2* 的假设下，选择满足(55) 和 $h \in [2C_\delta t_N, R_0]$ 的确定性图参数。对于每个 $0 < s \leq 1$ 和每个独立于 X 固定的 $f \in C^{0,s}(M)$，使用任一划分构造的估计量 (60) 均满足

$$0 \leq \mathbb{E}\left| \widehat{I}_{\mathrm{bl}}(f) - \int_{\mathcal{M}} f \, \mathrm{d}\nu \right|^2 - \frac{\mathrm{Var}_\nu(f)}{N} \leq C_s [f]_{C^{0,s}}^2 \left(h^{m+2s} + N^{-q} \right).$$

5 计算成本

令 E 表示 A的非零条目数，包括其对角线。下述运算次数中的常数可能取决于固定维数 d。

5.1 热核 DPP

我们区分计算投影 Π_h 的成本与根据 (18) 进行每次抽样所产生的成本。

预处理。 我们首先考虑构造 A 和 Z。对于 ε-图 (9)，我们首先需要计算两两距离 $|x_i - x_j|$，这需要 $O(dN^2)$ 次运算；随后通过将这些距离与 ε进行比较来得到该图。对于对称k-最近邻图 (10)，为每个 x_i 选取 k 个最近顶点，总共需要 $O(N^2)$ 次运算；根据这些选取结果构造 A^k 还需要额外的 $O(Nk)$ 次运算。

在定理 3.1 和 3.2 的事件上，我们有 $E = O(NK)$，其中 K 在 (11) 中定义。为了构造 (14) 中的 $Z = \{z_1、\ldots\ldots、z_n\}$，我们按标签顺序检查顶点。每当选中一个顶点 z_ℓ 时，我们就使用 Dijkstra 算法找出与 z_ℓ的距离在 ah 以内的所有顶点。这些顶点将从后续选取中排除。使用二叉堆时，每次搜索最多需要 $O((N+E)\log N)$ 次运算。由于共有 n 个中心，总成本为 $O(n(N+E)\log N)$。

接下来考虑 Π_h 的计算。根据式 (15)，回忆 Π_h 是投影到 B_h 值域上的正交投影。因此，只需计算一个 $N \times n$ 矩阵 Q_h ，其列构成该值域的标准正交基。对 B_h 进行简化 QR 分解，可得

$$B_h = Q_h R_h, \qquad \Pi_h = Q_h Q_h^*, \qquad \pi_i = \sum_{\ell=1}^{n} (Q_h)_{i\ell}^2. \tag{64}$$

该分解需要 $O(Nn^2)$ 次运算，存储 Q_h 需要 $O(Nn)$ 内存。特别地，我们无需构造 $N \times N$ 矩阵 Π_h。

接下来，我们考虑计算 $B_h = T_{h^2} E_Z$ 的近似值所需的开销。我们使用展开式

$$T^{(q)} := e^{-u} \sum_{j=0}^{q} \frac{u^j}{j!} S^j, \quad \text{where } S := D^{-1/2} A D^{-1/2},\ u := h^2/r^2. \tag{65}$$

由于 $\|S\|_{\mathrm{op}} \le 1$，对于任意 $0 < \eta < 1$ ，选择

$$q := \lceil 2eu + 2\log(1/\eta) \rceil \tag{66}$$

满足

$$\|T^{(q)} - T_{h^2}\|_{\mathrm{op}} \le \eta.$$

证明见附录 D。

此外，使用 $T^{(q)} E_Z$ 级数展开需要进行 $O(qEn)$次运算。将其与式（64）中 QR 分解的成本相结合，我们得到总成本为

$$O\big((h^2/r^2 + \log(1/\eta))En + Nn^2\big) \tag{67}$$

用于计算 Π_h 的近似，内存需求为 $O(E + Nn)$。在（30）的下端点处， h^2/r^2 的阶为 $\log(eK)$。

附录 D 还给出了 η 的充分取值，使得由 $T^{(q)}E_Z$ 计算得到的投影满足（36）、（37）和（44）。

$\widehat{}$对于式 (42) 中的估计量 $I_{h,\ N}(f)$，式 (41) 中的划分 C_1，……，C_n 可通过多源 Dijkstra 搜索在 $O((N+E)\log\ N)$ 次操作内构造。构造 Z和C_1，……，C_n 只需要 A、$A_{ij}\ =\ 1$对应的边长 $|x_i\ -\ x_j|$ 以及顶点索引，无需知道 $\mathcal{M}$ 或 ρ。对于固定函数 f，我们还会计算$f(x_{z_1})$，……，$f(x_{z_n})$。这些 n次计算可确定式 (41) 中的 A_hf和 $I_N(A_hf)$，并可在后续抽样中重复使用。

每次抽样的成本。</style}给定 Q_h，标准的序贯投影 DPP 抽样器每次抽样需要$O(Nn^2)$ 次操作。另一种选择是 Tremblay、Amblard 和 Barthelmé 的精确抽样器 [15]：首次抽样的预期成本为 $O(Nn+n^3\log(en))$，之后每次从同一投影中抽样的预期成本为 $O(n^3\log(en))$。

5.2 Haar DPP

接下来，我们考虑第 4 小节中引入的 Haar DPP 的计算成本。与 (15) 不同，(51) 中的投影 P_{sc} 可以直接由划分$C_1,\dots,C_n$构造。

我们先考虑 Z和 $C_1,\dots,C_n$的构造。构造好 A后，我们按照标签顺序检查顶点，如 (53) 所示。每当遇到一个尚未被覆盖的顶点时，就将其加入 Z，并使用 Dijkstra 算法确定 $B_N(z_\ell,h)$，在距离 h处停止搜索。将该球中的每个顶点都标记为已覆盖，并把此前未被覆盖的顶点分配给 C_ℓ，用于首次覆盖划分。

现在我们估算这些搜索的成本。对于任意顶点 i，根据 (53)，球 $B_N(z_\ell,h/2)$（其中$i\in B_N(z_\ell,h)$）两两不相交，且都包含在 $B_N(i,3h/2)$中。由 (190)，我们有

$$\#\{\ell:i\in B_N(z_\ell,h)\}\,c(h/2)^m\le C(3h/2+\delta)^m.$$

由于 $\delta\le h/2$，每个 i 顶点至多会在常数次搜索中被访问。因此，边检查的总次数被界定为

$$C\sum_{i=1}^{N}\#\{j:A_{ij}=1\}=O(E).$$

使用二叉堆，构造 Z 和首次覆盖划分因此需要$O((N+E)\log\ N)$次操作以及 $O(N+E)$的存储空间。

对于Voronoi划分，我们首先按上述方式构造 Z，然后将每个顶点分配给 d_N 中距离其最近的 z_ℓ，并依据索引 ℓ 解决并列情形。这可以通过多源 Dijkstra 搜索完成，其计算和存储界定相同。

一旦存储了 $C_1,\dots,C_n$，(52)便允许我们从每个 C_ℓ 中独立且均匀地选取一个顶点。因此，每次抽取需要 $O(n)$ 次操作，并且恰好需要对 f 进行 n 次求值。

人工智能声明

在本研究中，我们使用了标准的生成式人工智能工具来支持研究工作。作者提出了研究方向和详细的证明思路，并使用标准的生成式人工智能工具进行探索性模拟、文献检索、计算、部分证明的开发与简化以及排版。作者已核查所有步骤，并对本研究的最终内容负责。

参考文献

[1] R. Bardenet、S. Ghosh 和 M. Lin。基于正交多项式的行列式点过程，用于随机梯度下降中的小批量抽样。神经信息处理系统进展，34:16226–16237，2021。[2] Rémi Bardenet、Subhroshekhar Ghosh、Hugo Simon-Onfroy 和 Hoang Son Tran。通过负相关获得小型核心集：DPP、线性统计量与集中性。神经信息处理系统进展，37:84329–84349，2024。[3] Rémi Bardenet 和 Adrien Hardy。使用行列式点过程进行蒙特卡罗。应用概率年刊，30(1):368–417，2020。[4] Daryl Geller 和 Azita Mayeli。紧流形上的连续小波。数学杂志，262(4):895–927，2009。[5] J. B. Hough、M. Krishnapur、Y. Peres 和 B. Virág。高斯解析函数的零点与行列式点过程，第 51 卷。美国数学学会，2009。[6] J. Ben Hough、Manjunath Krishnapur、Yuval Peres 和 Bálint Virág。行列式过程与独立性。概率调查，3:206–229，2006。[7] A. Kulesza 和 B. Taskar。用于机器学习的行列式点过程。机器学习基础与趋势，2012。[8] Russell Lyons。行列式概率测度。高等科学研究院数学出版物，(98):167–212，2003。[9] Odile Macchi。随机点过程的重合方法。应用概率进展，7:83–122，1975。[10] Mathav Murugan 和 Laurent Saloff-Coste。度量测度空间上随机游走的哈纳克不等式与高斯估计。电子概率期刊，28(64):1–81，2023。[11] A. Soshnikov。行列式随机点场。俄罗斯数学调查，55:923–975，2000。[12] Hoang-Son Tran、Pranav Gupta、Rémi Bardenet 和 Subhroshekhar Ghosh。通过新型 DPP 核实现最先进的小批量：离散化、小波与粗糙目标函数。*arXiv* 预印本 *arXiv:2605.13127*，2026。[13] Hoang-Son Tran、Pranav Gupta 和 Subhroshekhar Ghosh。一般空间上的行列式抽样：通过扩散几何实现快速近似。*arXiv* 预印本 *arXiv:2607.06644*，2026。[14] H.S. Tran、V. Petrovic、R. Bardenet 和 S. Ghosh。将负相关作为机器学习的工具箱：综述与新进展。*arXiv* 预印本 *arXiv:2502.07285*，2025。[15] Nicolas Tremblay、Pierre-Olivier Amblard 和 Simon Barthelmé。使用行列式过程进行图抽样，2017。

第 2 节中的证明

在本附录中，我们采用第 2 节中的设定。特别地，$(\mathcal{M}\ g)$ 是一个固定的光滑、连通、闭黎曼流形，其维数为 $m \geq 1$。记作

$$V = \mathrm{vol}_g(\mathcal{M}), \qquad \mu = V^{-1}\,\mathrm{vol}_g, \qquad L = -\Delta_{\mathcal{M}},$$

并令 d 表示测地距离。固定一个实标准正交特征基 $\{\phi_k\}^{k\geq 1}$，它属于 $L^2(\mu)$，满足 $\phi_1 = 1$ 以及

$$L\phi_k = \lambda_k\phi_k, \qquad 0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots .$$

令 $\mathcal{U} = \{u_1, \ldots, u_J\}$ 为一个满足条件 (3) 的固定有限实谱滤波器族，其中至少有一个非零成员。对于这样的滤波器 u，记作

$$W_{u,h}(x,y) = \sum_{k\geq 1} u(h^2\lambda_k)\phi_k(x)\phi_k(y).$$

令 $a \geq 1$，并令 $h > 0$ 为局部化尺度。令 $\mathcal{Z} = \{z_1, \ldots, z_I\}$ 为一个极大 ah-分离集，并定义

$$\psi_{i,j}(x) = h^{m/2}W_{u_j,h}(x, z_i), \qquad 1 \leq i \leq I, \quad 1 \leq j \leq J.$$

Set

$$H_h := \mathrm{span}\{\psi_{i,j} : 1 \leq i \leq I,\ 1 \leq j \leq J\}, \qquad n_h := \dim H_h.$$

令 Π_h 为从 $L^2(\mu)$ 到 H_h 的正交投影，并令 K_h 为其积分核。所有核均相对于 μ 取定，而 $\|\cdot\|_2$ 表示 $L^2(\mu)$ 中的范数。

A.1 核的局部化性质

本小节旨在证明下文的引理 A.8，该引理指出，上述核 K_h满足

$$|K_h(x,y)| \leq Ch^{-m}\left(1 + \frac{d(x,y)}{h}\right)^{-(m+3)}$$

当 a 足够大且 h 足够小时。为此，我们需要以下技术要素。

谱乘子估计。

引理 A.1。 设 u 是 C^∞（$[0,\infty)$ 中的一个固定实函数，使得

$$\sup_{t\geq 0}(1+t)^N|u^{(q)}(t)| < \infty \quad \textit{for every pair of integers } N, q \geq 0.$$

对于每个 $h > 0$，核 $W_{u,\ h}$ 属于 u（h^2L），且光滑并取实值。对于每个整数 $p \geq 0$，存在一个常数 C_p，它仅依赖于（M g）、u 和 p，使得

$$|W_{u,h}(x,z)| \leq C_p h^{-m}(1 + d(x,z)/h)^{-p}, \qquad x, z \in \mathcal{M}, \quad 0 < h \leq 1. \tag{68}$$

证明。 Geller–Mayeli 的谱乘子定理 [4, 引理 4.1 和注 4.2]对每个整数 $p \geq 0$给出，

$$h^m(d(x,z)/h)^p|W_{u,h}(x,z)| \leq C_p, \qquad 0 < h \leq 1.$$

将 $p = 0$ 的界与所选 p 的界分别应用于 $d(x,\ z) \leq h$和 $d(x,\ z) > h$，即可证明（68）。□

引理 A.2。 设 u、v 是满足 （3） 的固定实滤波器。则关于 $z \in M$ 一致地，当$h \downarrow 0$时，

$$h^m W_{uv,h}(z,z) = \frac{V}{(2\pi)^m} \int_{\mathbb{R}^m} u(|\xi|^2) v(|\xi|^2)\, \mathrm{d}\xi + O(h). \tag{69}$$

特别是，如果 u 非零，那么

$$h^m W_{u^2,h}(z,z) = c_u + O(h), \qquad c_u = \frac{V}{(2\pi)^m} \int_{\mathbb{R}^m} u(|\xi|^2)^2\, \mathrm{d}\xi > 0. \tag{70}$$

余项常数仅取决于固定的流形和滤波器。

证明。 利用上文固定的特征基，写作

$$E_z(\Lambda) = \sum_{\lambda_k \le \Lambda} |\phi_k(z)|^2, \qquad \kappa_m = (2\pi)^{-m}\omega_m,$$

其中 ω_m 是欧几里得单位球体积。局部韦尔定律给出

$$E_z(\Lambda) = V\kappa_m \Lambda^{m/2} + O\big(1 + \Lambda^{(m-1)/2}\big), \qquad \Lambda \ge 0, \tag{71}$$

在有界区间上增大其常数后，余项是一致的。令 $q = u^2$，或令 $q = uv$。由于 q 光滑且快速衰减，谱演算和分部积分给出

$$W_{q,h}(z,z) = \int_{[0,\infty)} q(h^2\Lambda)\, \mathrm{d}E_z(\Lambda) = -\int_0^\infty E_z(t/h^2) q'(t)\, \mathrm{d}t.$$

将 (71) 乘以 h^m ，得到积分余项的界为

$$Ch^m \int_0^\infty |q'(t)|\, \mathrm{d}t + Ch \int_0^\infty t^{(m-1)/2} |q'(t)|\, \mathrm{d}t = O(h), \qquad 0 < h \le 1.$$

两个积分都是有限的，包括在 $m = 1$ 处。因此

$$\begin{aligned} h^m W_{q,h}(z,z) &= -V\kappa_m \int_0^\infty t^{m/2} q'(t)\, \mathrm{d}t + O(h) \\ &= V\kappa_m \frac{m}{2} \int_0^\infty t^{m/2-1} q(t)\, \mathrm{d}t + O(h) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^m} \int_{\mathbb{R}^m} q(|\xi|^2)\, \mathrm{d}\xi + O(h). \end{aligned}$$

借助零点处的光滑性和无穷远处的快速衰减，边界项消失。对于 $q = u^2$，当 u 不为零时，极限常数严格为正。这证明了（70）和（69）。

□

对于满足（3）的任意两个实滤波器，将帕塞瓦尔恒等式应用于谱展开可得

$$\int_{\mathcal{M}} W_{u,h}(x,z) W_{v,h}(x,z')\, \mathrm{d}\mu(x) = W_{uv,h}(z,z'). \tag{72}$$

事实上，这两个核作为 x 的函数，其系数分别为 $u(h^2\lambda_k)\phi_k(z)$和 $v(h^2\lambda_k)\phi_k(z')$；它们的内积就是右侧的谱级数。此恒等式中的所有核和内积均使用相同的参考测度 μ。

分离与装填。

Lemma A.3. 存在常数 R_0、 c_V、 $C_V > 0$，它们仅依赖于$(M\ g)$，使得 t

$$c_V R^m \le \mu(B(x,R)) \le C_V R^m, \qquad x \in \mathcal{M}, \quad 0 < R \le R_0. \tag{73}$$

相同的界定对闭球也成立。增大 C_V 后，上界对每个$R > 0$都成立。

证明。 取 R_0 小于单射半径。在以 x为中心的正规坐标中，半径为R 的测地球对应于欧几里得半径为R 的球。由紧致性可知，对于 $0 < R \le R_0$，体积密度具有一致的正下界和上界，从而证明了 (73)。在这些坐标中，边界球面的体积为零，因此这些估计对闭球也成立。对于 $R > R_0$，上界由 $\mu(\mathcal{M}) = 1$ 得出，只需将 C_V 增大到至少 R_0^{-m}。

□

引理 A.4。 设 $a \ge 1$和 $0 < r = ah \le R_0$，其中 R_0 如引理 *A.3* 中所述。设 $Z = \{z_1, \ldots, z_I\}$ 为一个极大的 r- 分离集。那么，闭球 $B(z_i, r)$ 覆盖 M，并且

$$cr^{-m} \le I \le Cr^{-m}, \qquad \#\{i : d(x,z_i) \le R\} \le C_P(1 + R/r)^m, \quad x \in \mathcal{M},\ R > 0. \tag{74}$$

这些常数仅取决于$(M\ g)$，与 a、 h 以及所选的极大集合无关。

证明。 </style'>开球 $(, r/2)$ 两两不相交。半径为 r 的闭球覆盖 $\mathcal{M}$，否则就可以加入一个与每个中心的距离都大于 r 的点。将引理 A.3 给出的下体积估计对这些不相交球求和，得到 $I \le Cr^{-m}$。将上界估计对覆盖球求和，得到 $I \ge cr^{-m}$。

若 $d(x, z_i) \le R$，则 $B(z_i, r/2) \subset B(x, R + r/2)$。因此

$$\#\{i : d(x,z_i) \le R\}\, c_V (r/2)^m \le C_V (R + r/2)^m,$$

这就证明了计数界。极大集合可通过不断添加符合条件的点而得到：不相交的半径减半球具有正的下体积，因此可能添加的点数有界。

□

格拉姆矩阵估计。令

$$b := \dim_{\mathbb{R}} \operatorname{span}\{u_1, \ldots, u_J\} \ge 1.$$

重新编号后，选取 $u_1, \ldots, u_b$ 作为线性无关的生成子族。在每个中心处，其余滤波器对应的原子都是这些 b 原子的线性组合，因此仅保留这个子族不会改变 H_h。我们用按中心索引的 $b \times b$ 分块矩阵表示。定义

$$\|T\|_{a,h} := \max_i \sum_j \|T_{ij}\|_{\mathrm{op}} (1 + d(z_i, z_j)/(ah))^{m+3}. \tag{75}$$

引理 A.5. 假设这些中心满足引理 *A.4*，且 $a \ge 1$。如果分块矩阵 E满足

$$\max_i \|E_{ii}\|_{\mathrm{op}} \le \delta, \qquad \|E_{ij}\|_{\mathrm{op}} \le C_0 (1 + d(z_i, z_j)/h)^{-(2m+4)} \quad (i \ne j),$$

then

$$\|E\|_{a,h} \le \delta + CC_0 a^{-(2m+4)}, \tag{76}$$

其中 C 仅取决于打包常数和 m。

证明。令 $r = ah$。对于固定的 i，将其他中心划分为

$$\mathcal{J}_k(i) = \{j \neq i : 2^k r \le d(z_i, z_j) < 2^{k+1} r\}, \qquad k \ge 0.$$

严格分离确保这些集合覆盖所有 $j \neq i$。打包给出 $|\mathcal{J}_k(i)| \le C 2^{km}$。在这个环带上，

$$(1 + d(z_i, z_j)/h)^{-(2m+4)} \le a^{-(2m+4)} 2^{-k(2m+4)},$$

而 (75) 中的权重至多为 $C 2^{k(m+3)}$。因此

$$\sum_{j \neq i} \|E_{ij}\|_{\mathrm{op}} (1 + d(z_i, z_j)/r)^{m+3} \le C C_0 a^{-(2m+4)} \sum_{k \ge 0} 2^{-k}.$$

加上对角项，并对 i 取最大值。 □

引理 A.6。设 $G = \mathrm{Id} + E$ 是以中心为索引的实对称分块矩阵，并假设 $\|E\|_{a,h} \le 1/2$。那么

$$\frac{1}{2}\,\mathrm{Id} \preceq G \preceq \frac{3}{2}\,\mathrm{Id},$$

其正逆平方根满足

$$\|G^{-1/2}\|_{a,h} \le \sqrt{2}. \tag{77}$$

相应的加权列和也满足相同的界。

证明。令 $w_{ij} = (1 + d(z_i,\ z_j)/(ah))^{m+3}$。由三角不等式可得 $w_{ij} \le w_{ik} w_{kj}$，因此

$$\|TU\|_{a,h} \le \|T\|_{a,h} \|U\|_{a,h}, \qquad \|\,\mathrm{Id}\,\|_{a,h} = 1.$$

由于 E 是对称的，$\|E_{ij}\|_{\mathrm{op}}$ 的行和与列和均不超过 $1/2$。由舒尔估计可得 $\|E\|_{\mathrm{op}} \le 1/2$，从而证明了 G上的谱界。

对于 $|t| < 1$，

$$(1 + t)^{-1/2} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k t^k, \qquad c_k = (-1)^k 4^{-k} \binom{2k}{k}.$$

由次乘性可知，代入E后，该级数在加权范数下收敛。根据谱定理，其和为 $F = G^{-1/2}$，并且

$$\|F\|_{a,h} \le \sum_{k=0}^{\infty} |c_k| 2^{-k} = \sqrt{2}.$$

加权列和满足相同的估计，因为 F 与权重都是对称的。

□

引理 A.7。对于上文固定的独立子族 $u_1, \ldots, u_b$，令 $G_h^{(b)}$ 为其原子的格拉姆矩阵，即

$$\psi_{i,\alpha}(x) = h^{m/2} W_{u_\alpha, h}(x, z_i), \qquad (G_h^{(b)})_{(i,\alpha),(j,\beta)} = \langle \psi_{i,\alpha}, \psi_{j,\beta} \rangle_{L^2(\mu)}.$$

那么，该矩阵

$$\mathsf{C}_{\alpha\beta} = \frac{V}{(2\pi)^m} \int_{\mathbb{R}^m} u_\alpha(|\xi|^2) u_\beta(|\xi|^2)\, \mathrm{d}\xi, \qquad 1 \le \alpha, \beta \le b,$$

是正定的。设 $c_* > 0$ 和 $C_* < \infty$ 分别为其最小和最大特征值，并设 D 为由 I 个 $\mathsf{C}^{-1/2}$ 副本组成的分块对角矩阵。

存在仅依赖于 $(M\ g)$ 和固定滤波器的 $a_0 \geq 1$，使得对于每个固定的 $a \geq a_0$，存在还额外依赖于 a 的 $h_0 > 0$，并具有以下性质。对于每个 $0 < h \leq h_0$ 以及任意极大 ah-分离集 Z，归一化格拉姆矩阵满足

$$\left\| D^\top G_h^{(b)} D - \mathrm{Id} \right\|_{a,h} \leq \frac{1}{2}, \tag{78}$$

其中，加权分块范数定义于 (75) 中。特别地，

$$\frac{c_*}{2}\,\mathrm{Id} \preceq G_h^{(b)} \preceq \frac{3C_*}{2}\,\mathrm{Id}\,. \tag{79}$$

所有估计在所示尺度和中心集上是一致的。

证明。 滤波器的快速衰减使得 C 的每个元素均为有限值。对于 $c \in \mathbb{R}^b$,

$$c^\top \mathsf{C} c = \frac{V}{(2\pi)^m} \int_{\mathbb{R}^m} \left| \sum_{\alpha=1}^{b} c_\alpha u_\alpha(|\xi|^2) \right|^2 \mathrm{d}\xi.$$

如果该量为零，则连续性和径向积分给出 $\sum_\alpha c_\alpha u_\alpha(t) = 0$ 对每个$t > 0$均成立。连续性还给出了在零点处同样成立的等式，而滤波器的线性无关性意味着 $c = 0$。因此，C 是正定的，所以 D 有定义。

复合恒等式 (72) 给出了精确的格拉姆矩阵元素

$$(G_h^{(b)})_{(i,\alpha),(j,\beta)} = h^m W_{u_\alpha u_\beta, h}(z_i, z_j). \tag{80}$$

对于具有共同中心的原子，引理 A.2 中的对角线谱渐近性意味着

$$\sup_i \|(G_h^{(b)})_{ii} - \mathsf{C}\|_{\mathrm{op}} \leq Ch, \qquad 0 < h \leq 1.$$

这些乘积 $u_\alpha u_\beta$ 也满足 (3)。对这些有限个指数为 $2m+4$ 的乘积应用引理 A.1，可得，对于 $i \neq j$,

$$\|(G_h^{(b)})_{ij}\|_{\mathrm{op}} \leq C \left(1 + \frac{d(z_i, z_j)}{h}\right)^{-(2m+4)}.$$

这两个常数仅依赖于固定的流形和滤波器。

Put

$$\widetilde{G}_h = D^\top G_h^{(b)} D = \mathrm{Id} + E_h.$$

因此，将每个中心块乘以固定矩阵 $\mathsf{C}^{-1/2}$ 可得

$$\sup_i \|(E_h)_{ii}\|_{\mathrm{op}} \leq C_1 h, \qquad \|(E_h)_{ij}\|_{\mathrm{op}} \leq C_2 \left(1 + \frac{d(z_i, z_j)}{h}\right)^{-(2m+4)} \qquad (i \neq j),$$

其中 C_1，C_2 与 a，h 及中心无关。当 $a \geq 1$ 和 $ah \leq R_0$ 时，引理 A.4 中的打包估计对于极大中心集是一致的。因此，由引理 A.5 得到

$$\|E_h\|_{a,h} \leq C_1 h + C_3 a^{-(2m+4)}.$$

该范数中的空间权重控制了与所有其他中心的相互作用之和，并且随着 I 增大，这种控制是一致的。常数 C_3 仅取决于流形和滤波器。

选择 $a_0 \geq 1$，使得 $C_3 a_0^{-(2m+4)} \leq 1/4$。对于每个固定的 $a \geq a_0$，选择 $0 < h_0 \leq 1$，使得 $C_1 h_0 \leq 1/4$ 和 $a h_0 \leq R_0$，其中 R_0 如引理 A.3 所述。这就证明了 (78) 对所有指定的尺度和中心集合都成立。由于 E_h 是实对称的，引理 A.6 得出

$$\frac{1}{2}\,\mathrm{Id} \preceq \widetilde{G}_h \preceq \frac{3}{2}\,\mathrm{Id}\,.$$

最后，$G_h^{(b)} = D^{-\top}\widetilde{G}_h D^{-1}$，并且 $D^{-\top}D^{-1}$ 的每个对角块都等于 C。最后一个不等式中的合同变换，接着进行 $c_*\,\mathrm{Id}_b \preceq \mathsf{C} \preceq C_*\mathrm{Id}_b$，即可证明（79）。 □

局部化性质。我们以核所需的局部化性质作为结论。

引理 A.8。对于附录开头固定的滤波器族和投影核，以下结论成立。存在 $a_0 = a_0(M\ g, U) \geq 1$，使得对于每个固定的$a \geq a_0$，存在 $h_0 = h_0(M\ g, U\ a) > 0$，满足以下性质。

对于 $0 < h \leq h_0$ 以及每个极大 ah-分离的中心集，投影到 H_h 上的核 K_h 满足

$$|K_h(x,y)| \leq C h^{-m}\left(1 + \frac{d(x,y)}{h}\right)^{-(m+3)}, \qquad x, y \in \mathcal{M}. \tag{81}$$

常数 C 仅取决于$(M\ g)$、固定的滤波器族 U 以及 a。

证明。使用上文选出的线性无关的张成子族 $u_1, \ldots, u_b$。对于每个中心，任意其余滤波器的原子都是所选原子的同一个固定线性组合，这是由谱演算的线性性决定的。因此，

$$H_h = \mathrm{span}\{\psi_{i,\alpha} : 1 \leq i \leq I,\ 1 \leq \alpha \leq b\}, \qquad \psi_{i,\alpha} = h^{m/2} W_{u_\alpha,h}(\cdot, z_i).$$

特别地，这一约化不会改变核为 K_h 的投影。

将引理 A.7 应用于这个独立子族，并使用其阈值 a_0, h_0。令 A_h 为约化后原子的合成映射，令 $G_h^{(b)} = A_h^* A_h$，并令 D 为该引理中的分块对角归一化。设

$$\widetilde{A}_h = A_h D, \qquad \widetilde{G}_h = D^\top G_h^{(b)} D, \qquad F_h = \widetilde{G}_h^{-1/2}.$$

该引理针对这些特定的谱原子验证了 $\|G_h - \mathrm{Id}\|_{a,h} \leq 1/2$。因此，由引理 A.6 可得

$$\|F_h\|_{a,h} \leq \sqrt{2}.$$

由于 F_h 是对称的，相应的加权列和也至多为 $\sqrt{2}$。

记 $\widetilde{\psi}_i(x)$ 表示基变换 D 后中心 z_i 处 b 原子组成的向量。引理 A.1 中指数为 $m+3$ 的乘子估计给出

$$\|\widetilde{\psi}_i(x)\|_{\mathbb{R}^b} \leq C h^{-m/2}\left(1 + \frac{d(x,z_i)}{h}\right)^{-(m+3)}. \tag{82}$$

这个常数是统一的，因为每个中心处的基变换都是相同的固定矩阵。令 $\eta_{i,\alpha}$ 为 $A_h F_h$的列。我们将它们的值分组如下

$$\eta_i(x) = (\eta_{i,1}(x), \ldots, \eta_{i,b}(x))^\top, \qquad \|\eta_i(x)\|_{\mathbb{R}^b} = \left(\sum_{\alpha=1}^{b} |\eta_{i,\alpha}(x)|^2\right)^{1/2}.$$

这是不动点 x处的欧几里得范数。这些向量满足

$$\eta_i(x) = \sum_{j=1}^{I} (F_h)_{ji}^{\top} \widetilde{\psi}_j(x).$$

三角不等式和 $a \geq 1$ 蕴含

$$1 + \frac{d(x, z_i)}{h} \leq a \left(1 + \frac{d(x, z_j)}{h}\right) \left(1 + \frac{d(z_j, z_i)}{ah}\right).$$

将该不等式与 (82) 结合可得

$$\|\eta_i(x)\|_{\mathbb{R}^b} \leq C a^{m+3} h^{-m/2} \left(1 + \frac{d(x, z_i)}{h}\right)^{-(m+3)} \sum_j \|(F_h)_{ji}\|_{\mathrm{op}} \left(1 + \frac{d(z_j, z_i)}{ah}\right)^{m+3}.$$

加权列界现在给出

$$\|\eta_i(x)\|_{\mathbb{R}^b} \leq C h^{-m/2} \left(1 + \frac{d(x, z_i)}{h}\right)^{-(m+3)}. \tag{83}$$

这证明了实际构造中正交化原子的局部化 .

接下来我们确定它们的投影。直接相乘可得

$$(\widetilde{A}_h F_h)^*(\widetilde{A}_h F_h) = F_h \widetilde{G}_h F_h = \mathrm{Id}\,.$$

~两者 D 和 F_h 均可逆，因此 $A_h F_h = A_h D F_h$ 的值域恰好为 H_h。因此，其列构成了 H_h的标准正交基，而正文中定义的投影 Π_h 为

$$\Pi_h = (\widetilde{A}_h F_h)(\widetilde{A}_h F_h)^* = A_h (G_h^{(b)})^{-1} A_h^*.$$

特别地，它的核为

$$K_h(x, y) = \sum_{i=1}^{I} \sum_{\alpha=1}^{b} \eta_{i,\alpha}(x) \eta_{i,\alpha}(y) = \sum_{i=1}^{I} \eta_i(x)^{\top} \eta_i(y). \tag{84}$$

所有这些函数都是由原始原子构成的光滑有限线性组合。因此，积分算子相等意味着它们的光滑核在$\mathcal{M} \times \mathcal{M}$上处处相等。

剩下的工作是对（83）求和。令 $v_i(x) = (1 + d(x, z_i)/h)^{-(m+3)}$。引理 A.4 中的打包界给出

$$\begin{aligned} \sup_{x \in \mathcal{M}} \sum_i v_i(x) &\leq C_P (1 + a^{-1})^m + C_P \sum_{k \geq 0} 2^{-k(m+3)} (1 + 2^{k+1}/a)^m \\ &\leq C. \end{aligned} \tag{85}$$

事实上，第一项统计距离为 h的中心，而第 k 项界定了距离介于 $2^k h$和 $2^{k+1} h$之间的中心所作的贡献。对于每个中心 z_i， $d(x, z_i)$ 和 $d(y, z_i)$ 中至少有一个不小于 $d(x, y)/2$。由此可得

$$\begin{aligned} \sum_i v_i(x) v_i(y) &\leq \left(1 + \frac{d(x, y)}{2h}\right)^{-(m+3)} \left(\sum_i v_i(x) + \sum_i v_i(y)\right) \\ &\leq C \left(1 + \frac{d(x, y)}{h}\right)^{-(m+3)}. \end{aligned}$$

最后，（84）和（83）推出

$$|K_h(x, y)| \leq C h^{-m} \sum_i v_i(x) v_i(y) \leq C h^{-m} \left(1 + \frac{d(x, y)}{h}\right)^{-(m+3)}.$$

对于正文中的核，这是式 (81)。对于固定的 a 和滤波器族，在所述尺度和中心集上，每个常数都是一致的。 □

A.2 定理 2.1 的证明

取处于引理 A.8 所述情形中的 $a \geq a_0$ 和 $0 < h \leq h_0$。在本小节中，K_h 始终表示由该滤波器族以及附录开头固定的中心构造的投影核。

回顾一下，对于测试函数 f，我们有

$$\operatorname{Var}\left[\mathcal{S}_h(f)\right] = \frac{1}{2}\iint_{\mathcal{M}^2} |f(x) - f(y)|^2 |K_h(x,y)|^2 \,\mathrm{d}\mu(x)\mathrm{d}\mu(y). \tag{86}$$

Hölder观测函数。令 f 属于 $C^{0,s}(\mathcal{M})$，且满足 $0 < s \leq 1$。固定 x，将 y 积分分解为 $d(x,y) \leq h$ 以及环带 $2^j h < d(x,y) \leq 2^{j+1}h$，$j \geq 0$。由核估计和引理 A.3 中的体积估计可得

$$\int_{d(x,y)\leq h} d(x,y)^{2s} |K_h(x,y)|^2 \,\mathrm{d}\mu(y) \leq Ch^{2s-2m}\mu(\overline{B}(x,h)) \leq Ch^{2s-m}.$$

在第 j 个环带上，相应的积分至多为

$$Ch^{-2m}2^{-2j(m+3)}(2^{j+1}h)^{2s}\mu(\overline{B}(x,2^{j+1}h)) \leq C_s h^{2s-m}2^{j(2s-m-6)}.$$

对于任意 $0 < s \leq 1$，该级数都是可求和的。将 $|f(x) - f(y)| \leq [f]_{C^{0,s}} d(x,y)^s$ 代入（86），并利用 $\mu(\mathcal{M}) = 1$，得到

$$\operatorname{Var}\left[\mathcal{S}_h(f)\right] \leq C_s h^{2s-m}[f]^2_{C^{0,s}}.$$

注意到 $n_h \asymp h^{-m}$。这就完成了 Hölder观测函数情形的证明。

Sobolev观测函数 令 $f \in H^s(\mathcal{M})$ 满足 $0 < s < 1$。对于 $t > 0$，令 $v = t/h$。由于$0 < s < 1$,

$$h^{-2m}(1 + t/h)^{-2m-6} = h^{2s-m}t^{-m-2s}\frac{v^{m+2s}}{(1+v)^{2m+6}} \leq h^{2s-m}t^{-m-2s}.$$

由（81）可得

$$|K_h(x,y)|^2 \leq Ch^{2s-m}d(x,y)^{-m-2s}, \qquad x \neq y.$$

将其代入（86），可将方差界定为 $Ch^{2s-m}[f]^2_{H^s}$。利用 $n_h \asymp h^{-m}$，即可得到 $f \in H^s(\mathcal{M})$ 在满足 $0 < s < 1$ 时所需的方差缩减。

对于 $s = 1$，即 $f \in H^1(\mathcal{M})$，所需的增量控制由局部Poincaré不等式得到。我们首先建立用于对局部化核进行积分的成对估计。

引理 A.9。存在一个常数 C，其仅依赖于 $(M\ g)$，使得对于任意 $f \in H^1(M)$ 和 $R > 0$,

$$D_f(R) := \iint_{d(x,y)\leq R} |f(x) - f(y)|^2 \,\mathrm{d}\mu(x)\mathrm{d}\mu(y) \leq CR^{m+2}\int_{\mathcal{M}} |\nabla f|_g^2 \,\mathrm{d}\mu. \tag{87}$$

证明。选取足够小的 $R_* > 0$，使得半径不超过 $4R_*$ 的测地球具有一致的体积比较和局部庞加莱不等式

$$\int_{B(z,t)} |f - f_{B(z,t)}|^2 \,\mathrm{d}\mu \leq Ct^2 \int_{B(z,t)} |\nabla f|_g^2 \,\mathrm{d}\mu, \qquad 0 < t \leq 4R_*.$$

这里 $f_B = \mu(B)^{-1}\int_B f\,\mathrm{d}\mu$。这些不等式可通过在正规坐标中拉回到欧几里得球上得到：度量和体积密度与其欧几里得对应物一致可比，而均值使常数项上的平方误差最小。

对于 $0 < R \le R_*$，取一个极大的严格 R-分离集 $\{x_\ell\}$，并令 $B_\ell = B(x_\ell, 3R)$。对于每一对满足 $d(x,y) \le R$ 的点，半径为 R 的覆盖使 x 距某个 x_ℓ 不超过 R，因此 x 和 y 都属于 B_ℓ。于是

$$\mathbf{1}_{\{d(x,y)\le R\}} \le \sum_\ell \mathbf{1}_{B_\ell}(x)\mathbf{1}_{B_\ell}(y) \quad \text{for all } x, y.$$

族 (B_ℓ) 有有界重叠。事实上，当 $x \in B_\ell$ 时，不相交球 $B(x_\ell, R/2)$ 包含于 $B(x, 7R/2)$ 中，而体积比较可对其数量给出关于 R 的一致界定。

对于光滑的 f，恒等式

$$\iint_{B\times B} |f(x)-f(y)|^2\,\mathrm{d}\mu(x)\mathrm{d}\mu(y) = 2\mu(B)\int_B |f - f_B|^2\,\mathrm{d}\mu$$

因此得到

$$\begin{aligned} D_f(R) &\le 2\sum_\ell \mu(B_\ell)\int_{B_\ell} |f - f_{B_\ell}|^2\,\mathrm{d}\mu \\ &\le CR^{m+2}\sum_\ell \int_{B_\ell} |\nabla f|_g^2\,\mathrm{d}\mu \le C' R^{m+2}\int_{\mathcal{M}} |\nabla f|_g^2\,\mathrm{d}\mu. \end{aligned}$$

对于 $R \ge R_*$，连通性给出 $\lambda_2 > 0$，且全局庞加莱不等式 $\|f - \int f\,\mathrm{d}\mu\|_2^2 \le \lambda_2^{-1}\int |\nabla f|_g^2\,\mathrm{d}\mu$。因此

$$\begin{aligned} D_f(R) &\le \iint_{\mathcal{M}^2} |f(x)-f(y)|^2\,\mathrm{d}\mu(x)\mathrm{d}\mu(y) \\ &= 2\left\| f - \int_{\mathcal{M}} f\,\mathrm{d}\mu\right\|_2^2 \le C\int_{\mathcal{M}} |\nabla f|_g^2\,\mathrm{d}\mu \\ &\le CR_*^{-m-2}R^{m+2}\int_{\mathcal{M}} |\nabla f|_g^2\,\mathrm{d}\mu. \end{aligned}$$

最后，光滑函数在 $H^1(\mathcal{M})$ 中稠密，并且它们的成对增量在$L^2(\mathcal{M}^2)$ 中收敛，因为

$$\|v(x) - v(y)\|_{L^2(\mathcal{M}^2)} \le 2\|v\|_{L^2(\mu)}.$$

取极限即可证明对所有 $f \in H^1(\mathcal{M})$ 都成立。 □

令 $D_f(R)$ 为引理 A.9 中的成对积分。将 (86) 分解为 $d(x,y) \le h$ 和环带 $2^j h < d(x,y) \le 2^{j+1}h$。由核估计和引理 A.9 可得

$$\begin{aligned} \operatorname{Var}\left[\mathcal{S}_h(f)\right] &\le Ch^{-2m}\left(D_f(h) + \sum_{j\ge 0} 2^{-2j(m+3)} D_f(2^{j+1}h)\right) \\ &\le Ch^{2-m}\int_{\mathcal{M}} |\nabla f|_g^2\,\mathrm{d}\mu\left(1 + \sum_{j\ge 0} 2^{-j(m+4)}\right). \end{aligned}$$

使用 $n_h \asymp h^{-m}$ 可得该结果。

A.3 定理 2.2 的证明

一致强度界 将 $p_t(x,\ y)$ 记为相对于 μ 的 e^{-tL} 核。在本小节中，我们将附录开头固定的族特化为 $\mathcal{U} = \{u_1,\ u_2\}$，其中

$$u_1(t) = e^{-t} - e^{-2t}, \qquad u_2(t) = e^{-2t} - e^{-4t}.$$

两个滤波器都满足 (3)，其原子为

$$\psi_{i,1}(x) = h^{m/2}(p_{h^2} - p_{2h^2})(x, z_i), \qquad \psi_{i,2}(x) = h^{m/2}(p_{2h^2} - p_{4h^2})(x, z_i).$$

按中心对 $2I$ 原子排序，并令

$$\Psi_h(x) = (\psi_{1,1}(x), \psi_{1,2}(x), \dots, \psi_{I,1}(x), \psi_{I,2}(x))^\top.$$

令 G_h 为它们在 $L^2(\mu)$ 中的格拉姆矩阵。

Lemma A.10. 对于每个 $h > 0$ 和任意有限中心集，两个热滤波原子的格拉姆矩阵具有以下中心块

$$(G_h)_{i\ell} = h^m \begin{pmatrix} p_{2h^2} - 2p_{3h^2} + p_{4h^2} & p_{3h^2} - p_{4h^2} - p_{5h^2} + p_{6h^2} \\ p_{3h^2} - p_{4h^2} - p_{5h^2} + p_{6h^2} & p_{4h^2} - 2p_{6h^2} + p_{8h^2} \end{pmatrix} (z_i, z_\ell). \tag{88}$$

Proof. 热半群恒等式中，所有核均相对于同一测度 μ, is

$$\int_{\mathcal{M}} p_{sh^2}(x, z_i) p_{th^2}(x, z_\ell)\, \mathrm{d}\mu(x) = p_{(s+t)h^2}(z_i, z_\ell), \qquad s, t > 0.$$

展开两个差的乘积即可得到 (88)。 □

定义 2×2 矩阵

$$\mathsf{C}_{\alpha\beta} := \frac{V}{(2\pi)^m} \int_{\mathbb{R}^m} u_\alpha(|\xi|^2) u_\beta(|\xi|^2)\, \mathrm{d}\xi, \qquad \alpha, \beta \in \{1, 2\}.$$

令 c_* 和 C_* 分别表示其最小和最大特征值。

引理 A.11. 矩阵 C 是正定的。存在 $a_0 = a_0(M\ g)\ \geq 1$，使得对于每个固定的 $a \geq a_0$，都存在 $h_0 = h_0(M\ g, a)\ > 0$ 满足以下性质。若 $0 < h \leq h_0$ 且 $Z = \{z_1, \dots, z_I\}$ 是任意一个极大 ah-分离集，则

$$\frac{c_*}{2} \operatorname{Id}_{2I} \preceq G_h \preceq \frac{3C_*}{2} \operatorname{Id}_{2I}. \tag{89}$$

因此， $2I$ 原子线性无关， $n_h = 2I \asymp h^{-m}$，且其正交投影的核为

$$K_h(x, y) = \Psi_h(x)^\top G_h^{-1} \Psi_h(y), \qquad x, y \in \mathcal{M}. \tag{90}$$

隐含常数仅依赖于 $(M\ g)$ 和 a，并且在可容许尺度和中心集上是一致的。

证明。 这两个滤波器线性无关。事实上， $u_1(t)\ > 0$ 对 $t > 0$成立，并且

$$\frac{u_2(t)}{u_1(t)} = e^{-t}(1 + e^{-t})$$

不是常数。因此，矩阵 C 是正定的：如果向量 $c \in \mathbb{R}^2$ 满足 $c^\top \mathsf{C} c = 0$，则由连续性可知，对于所有 $t > 0$，$c_1 u_1(t) + c_2 u_2(t) = 0$，而线性无关性给出 $c = 0$。引理 A.7 中的谱 Gram 界（79）在充分大的固定 a 和充分小的 h 下给出（89）。特别地，这些原子是线性无关的，并且 $n_h = 2I$。引理 A.4 给出，对于固定的 a，有 $I \asymp h^{-m}$。

为完整起见，令 $T_h : \mathbb{R}^{2I} \to L^2(\mu)$ 为这些原子的合成映射。于是$T_h^* T_h = G_h$，且 $T_h G_h^{-1} T_h^*$是自伴的，在 T_h的值域上等于恒等映射，并在其正交补上为零。因此它是 Π_h，这就证明了 (90)。

□

引理 A.12. 令 p_t 为关于 μ的热核，并固定 $a, c > 0$。则

$$\sup_{\substack{z \in \mathcal{M},\ v \in T_z\mathcal{M} \\ |v|_g \le a}} |h^m p_{ch^2}(\exp_z(hv), z) - V q_c(v)| \longrightarrow 0 \quad as\ h \downarrow 0, \tag{91}$$

其中

$$q_c(v) = (4\pi c)^{-m/2} e^{-|v|_g^2/(4c)}.$$

证明。 在一致选取的正规邻域内，局部热核展开表明，对每个固定的 $A < \infty$

$$p_t(x,z) = V(4\pi t)^{-m/2} e^{-d(x,z)^2/(4t)} \big(b_0(x,z) + O_A(t)\big), \qquad d(x,z) \le A\sqrt{t},$$

其中 b_0 在对角线附近光滑，且 $b_0(z,z) = 1$。余项包含在所示的前因子内，并且在所述区域内一致。对于 $x = \exp_z(hv)$，$|v| \le a$ 和 $t = ch^2$，可得

$$h^m p_{ch^2}(\exp_z(hv), z) = V q_c(v) \big(b_0(\exp_z(hv), z) + O_{a,c}(h^2)\big).$$

紧致性意味着，对于 $z \in \mathcal{M}$ 以及 $|v|_g \le a$，$b_0(\exp_z(hv)\ z) \to 1$ 一致成立。这就证明了 (91)。

□

引理 A.13 (一致强度界)。 对于引理 *A.11* 中每个固定的 $a \ge a_0$，其阈值 h_0 可以调低，且只需依赖于$(M\ g)$ 和 a，使得以下结论成立。对于 $0 < h \le h_0$ 以及每个极大的 ah-分离集，存在常数 c_ρ、$C_\rho > 0$，且只依赖于$(M\ g)$ 和 a，使得

$$c_\rho n_h \le K_h(x,x) \le C_\rho n_h, \qquad x \in \mathcal{M}. \tag{92}$$

这些常数关于 h、中心集和 x是一致的。

证明。 我们先从上方界定对角线。引理 A.1 中的局部化估计给出

$$\|\Psi_h(x)\|_{\mathbb{R}^{2I}}^2 \le C h^{-m} \sum_{i=1}^{I} (1 + d(x, z_i)/h)^{-2m-6}.$$

根据引理 A.4 中的打包估计，$d(x, z_i) \le h$ 的贡献有界，而 $2^k h < d(x, z_i) \le 2^{k+1} h$ 的贡献至多为

$$C 2^{-k(2m+6)} (1 + 2^{k+1}/a)^m, \qquad k \ge 0.$$

所得级数在 $a \ge 1$上一致收敛。因此 $\|\Psi_h(x)\|_{\mathbb{R}^{2I}}^2 \le C h^{-m}$，而（89）中的 Gram 下界给出

$$K_h(x,x) \le \frac{2}{c_*} \|\Psi_h(x)\|_{\mathbb{R}^{2I}}^2 \le C h^{-m} \le C_\rho n_h.$$

对于下界，令

$$q_c(v) := (4\pi c)^{-m/2} e^{-|v|^2/(4c)}, \qquad w_1(v) := q_1(v) - q_2(v), \qquad w_2(v) := q_2(v) - q_4(v).$$

这些比值

$$\frac{q_1(v)}{q_2(v)} = 2^{m/2} e^{-|v|^2/8}, \qquad \frac{q_2(v)}{q_4(v)} = 2^{m/2} e^{-|v|^2/16}$$

表明

$$w_1(v) = 0 \iff |v|^2 = 4m \log 2, \qquad w_2(v) = 0 \iff |v|^2 = 8m \log 2.$$

Thes e零点集互不相交，因为 $m \geq 1$。对每个固定的 a，紧致性因此给出 s

$$\gamma_a := \min_{|v| \leq a} \big(|w_1(v)|^2 + |w_2(v)|^2 \big) > 0. \tag{93}$$

引理 A.12 中的局部热核渐近给出

$$\begin{pmatrix} h^m (p_{h^2} - p_{2h^2})(\exp_z(hv), z) \\ h^m (p_{2h^2} - p_{4h^2})(\exp_z(hv), z) \end{pmatrix} \longrightarrow V \begin{pmatrix} w_1(v) \\ w_2(v) \end{pmatrix}$$

在满足 $|v|_g \leq a$的 $z \in \mathcal{M}$ 与 $v \in T_z\mathcal{M}$ 上一致成立。右侧函数是径向的，因此该公式与 T_z $\mathcal{M}$上正交坐标的选取无关。

减小 h_0 ，使得 ah_0 低于单射半径，且该向量极限中的一致误差至多为 $V\sqrt{\gamma_a}/2$。极大性保证，对每个 $x \in \mathcal{M}$，存在中心 z_i ，满足$d(x, z_i) \leq ah$。记 $x = \exp_{z_i}(hv)$，其中 $|v|_g \leq a$，我们得到

$$|\psi_{i,1}(x)|^2 + |\psi_{i,2}(x)|^2 \geq \frac{V^2 \gamma_a}{4} h^{-m}.$$

(89) 中的 Gram 矩阵上界现在推出

$$K_h(x, x) \geq \frac{2}{3C_*} \|\Psi_h(x)\|^2_{\mathbb{R}^{2I}} \geq \frac{V^2 \gamma_a}{6C_*} h^{-m} \geq c_\rho n_h.$$

这就证明了 (92)。 h_0 的选取可以依赖于固定的 a，c_ρ 也可以通过 γ_a依赖于它；这里并未声称存在关于 $a \to \infty$ 的统一下界。 □

Voronoi 胞上的逼近。

引理 A.14. 设 $ah \leq R_0$，其中 R_0 如引理 *A.3* 中所述。令 $V_1, \ldots, V_I$ 为 Z 的测地 *Voronoi* 胞，并将并列情形分配给最小的索引，再令 $v_i = \mu(V_i)$。这些单元是可测的，并且满足

$$\overline{B}(z_i, ah/2) \subset V_i \subset \overline{B}(z_i, ah), \qquad c(ah)^m \leq v_i \leq C(ah)^m, \qquad \operatorname{diam}(V_i) \leq 2ah. \tag{94}$$

这些常数仅依赖于 $(M\ g)$。

证明。 每个单元都是由连续距离函数之间的严格或非严格不等式所定义的集合的有限交，因此是可测的。若 $d(x, z_i) \leq ah/2$ 且 $j \neq i$，则由严格分离可得

$$d(x, z_j) \geq d(z_i, z_j) - d(x, z_i) > ah - d(x, z_i) \geq d(x, z_i).$$

因此， z_i 是唯一最近中心，从而证明了第一个包含关系。引理 A.4 的覆盖性质保证每个点到某个中心的距离不超过 ah。因此，属于 V_i 意味着$d(x,\ z_i) \leq ah$，从而证明了第二个包含关系。胞腔质量界由引理 A.3 得出，而直径估计则由三角不等式得出。无需对胞腔边界的正则性作任何要求。

□

引理 A.15。令 $0 < s \le 1$ 和 $f \in C^{0,\,s}(M)$。对于 (94) 中的 *Voronoi*划分，令

$$A_h f(x) := \sum_{i=1}^{I} f(z_i)\mathbf{1}_{V_i}(x).$$

Then

$$\|f - A_h f\|^2_{L^2(\mu)} \le (ah)^{2s}[f]^2_{C^{0,s}}. \tag{95}$$

证明。若 $x \in V_i$，则 $d(x,\ z_i) \le ah$。因此 $|f(x) - f(z_i)| \le (ah)^s[f]_{C^{0,\,s}}$，并对 $\mu(\mathcal{M}) = 1$ 积分即可证明 (95)。 □

引理 A.16. 设 $0 < s \le 1$ 和 $f \in H^s(M)$。对于 (94) 中的 *Voronoi*划分，设 U_i具有分布 $v_i^{-1}\mu|_{V_i}$，且在各单元之间相互独立。取 f 的任意可测代表元，令

$$A_h f(x) := \sum_{i=1}^{I} f(U_i)\mathbf{1}_{V_i}(x).$$

Then

$$\mathbb{E}\|f - A_h f\|^2_{L^2(\mu)} \le C_s(ah)^{2s}[f]^2_{H^s}. \tag{96}$$

该常数仅依赖于 $(M\ g)$ 和 s，并且对所考虑的尺度、中心集和可观测量均一致。

证明。对于随机近似，每个采样值几乎处处有限，并且

$$\mathbb{E}\|A_h f\|^2_{L^2(\mu)} = \sum_i v_i \mathbb{E}|f(U_i)|^2 = \int_{\mathcal{M}} |f|^2 \,\mathrm{d}\mu < \infty.$$

托内利定理给出精确恒等式

$$\mathbb{E}\|f - A_h f\|^2_{L^2(\mu)} = \sum_{i=1}^{I} \frac{1}{v_i} \iint_{V_i \times V_i} |f(x) - f(y)|^2 \,\mathrm{d}\mu(x)\,\mathrm{d}\mu(y). \tag{97}$$

若 $0 < s < 1$，则对角线的乘积测度为零，而 (94) 给出

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\|f - A_h f\|^2_{L^2(\mu)} &\le C(ah)^{-m}(2ah)^{m+2s} \sum_i \iint_{(V_i \times V_i)\cap\{x \ne y\}} \frac{|f(x) - f(y)|^2}{d(x,y)^{m+2s}} \,\mathrm{d}\mu(x)\,\mathrm{d}\mu(y) \\ &\le C_s(ah)^{2s}[f]^2_{H^s}.\end{aligned}$$

这里的集合 $V_i \times V_i$ 两两不相交，因此它们的积分由对 $\mathcal{M}^2$ 上的积分所界定。

对于 $s = 1$，利用 (97)、单元质量下界和直径估计可得

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\|f - A_h f\|^2_{L^2(\mu)} &\le C(ah)^{-m} \iint_{d(x,y)\le 2ah} |f(x) - f(y)|^2 \,\mathrm{d}\mu(x)\,\mathrm{d}\mu(y) \\ &\le C(ah)^2[f]^2_{H^1},\end{aligned}$$

其中最后一个不等式来自引理 A.9。 □

定理 *2.2* 的证明。选取 a_0，并对每个固定的 $a \ge a_0$，选取 h_0，使引理 A.11 和 A.13 适用。这些引理给出了证明中用到的两个构造估计：

$$n_h = 2I \asymp h^{-m}, \qquad \rho_h(x) := K_h(x,x) \ge c_\rho n_h \quad \text{for every } x \in \mathcal{M}.$$

我们将证明，均方误差有界于 $(c_\rho n_h)^{-1}$ 倍的均方$L^2(\mu)$ 近似误差。随后，单元逼近估计将提供因子 h^{2s}。

对于 Hölder估计量，令 $A_h f$ 在 V_i 上等于 $f(z_i)$；对于 Sobolev估计量，则令 f在 V_i 上等于 $f(U_i)$。这些是引理A.15和A.16中的近似。在后一种情况下，点 U_i 独立于$\mathcal{S}_h$。该估计量的形式为

$$\widehat{\mathcal{I}}_h(f) = \int_{\mathcal{M}} A_h f \,\mathrm{d}\mu + \sum_{x\in\mathcal{S}_h} \frac{f(x) - A_h f(x)}{\rho_h(x)}. \tag{98}$$

因此，第一项是所选近似的精确积分，而第二项则估计残差的积分。因子 $1/\rho_h$ 补偿了 DPP 的采样强度。

在 Sobolev 情形下，先对 $U_1,\dots,U_I$ 进行条件化。这固定了 $A_h f$，并使$\mathcal{S}_h$ 的分布保持不变。根据引理 A.16，残差几乎必然属于 $L^2(\mu)$；对于确定性的 Hölder 近似，这一点同样成立。此外，

$$\int_{\mathcal{M}} \left|\frac{f - A_h f}{\rho_h}\right|^2 \rho_h \,\mathrm{d}\mu \le \frac{1}{c_\rho n_h} \|f - A_h f\|^2_{L^2(\mu)} < \infty.$$

因此

$$\mathbb{E}[\widehat{\mathcal{I}}_h(f) \mid U_1,\dots,U_I] = \int_{\mathcal{M}} A_h f \,\mathrm{d}\mu + \int_{\mathcal{M}} (f - A_h f)\,\mathrm{d}\mu = \mathcal{I}(f).$$

对于 Hölder 估计量，无需进行条件化，同样的计算依然成立。特别是，对于辅助样本几乎所有的实现，校正项都能在期望意义下精确消除近似的积分误差。

为界定剩余波动，注意到

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}[\widehat{\mathcal{I}}_h(f) \mid U_1,\dots,U_I] &\le \int_{\mathcal{M}} \frac{|f - A_h f|^2}{\rho_h}\,\mathrm{d}\mu \\ &\le \frac{1}{c_\rho n_h}\|f - A_h f\|^2_{L^2(\mu)}.\end{aligned}$$

条件均值是固定数 $\mathcal{I}(f)$。因此，条件均值的方差为零，对条件方差取均值得到

$$\mathbb{E}\left|\widehat{\mathcal{I}}_h(f) - \mathcal{I}(f)\right|^2 \le \frac{1}{c_\rho n_h}\mathbb{E}\|f - A_h f\|^2_{L^2(\mu)}. \tag{99}$$

对于确定性近似，右侧的期望被省略。这解释了为什么随机单元值通过其近似误差产生影响，而其加权和无需额外的方差项。

这些单元的直径至多为 $2ah$。根据（95）和（96），式（99）的右侧分别至多为

$$C_s n_h^{-1} h^{2s} \begin{cases} [f]^2_{C^{0,s}}, & \text{for the estimator in (5)},\\ [f]^2_{H^s}, & \text{for the estimator in (6)}.\end{cases}$$

这里，固定因子 a^{2s} 已吸收到常数中。关系式 $n_h \asymp h^{-m}$ 将 $n_h^{-1}h^{2s}$ 转换为 $n_h^{-1-2s/m}$，并证明了两个均方误差界定。DPP 方差界定与强度下界共同给出因子 n_h^{-1}。因子 $n_h^{-2s/m}$ 来自直径为 h 阶的单元上的近似。

□

B 第 3 节的证明

B.1 定理 3.1 和 3.2 的证明

B.1.1 点云的几何

我们使用 $\mathcal{M}$ 的紧致性和光滑性的以下推论。存在正的结构常数 c, C, ℓ_0, κ_0 ，使得

$$c\min\{R^m, 1\} \le \mu(B_{\mathcal{M}}(x,R)) \le C\min\{R^m,1\}, \qquad R>0, \tag{100}$$

$$|x-y| \le d_{\mathcal{M}}(x,y) \le \kappa_0|x-y|, \qquad |x-y|\le \ell_0. \tag{101}$$

对于充分小的 R，(100) 由局部坐标中黎曼度量与欧几里得度量的一致可比性得到。对于较大的 R，界定由紧致性和连通性得到。

对于 (101)，第一个不等式由 $d_{\mathcal{M}}$ 的定义得到。由于 $\mathcal{M}$ 是紧致的光滑嵌入流形，任意两个欧几里得距离充分小的点都位于同一个坐标邻域中，在该邻域内，它们可以由一条长度至多为$\kappa_0|x-y|$的曲线连接

引理 B.1。固定 $0<\alpha\le\beta<\infty$ 和充分小的 $\eta_0>0$。存在常数r_0、c、$C>0$，它们取决于这些参数和结构数据，使得以下结论成立。设 $0<r\le r_0$ 和 $K=Nr^m\ge 1$。存在一个事件 $E_{N,\,r}$ 满足

$$\mathbb{P}(\mathcal{E}_{N,r}) \ge 1 - Cr^{-m}e^{-cK} \tag{102}$$

其上存在M上的概率测度 $\widetilde{\mu}$ 以及可测划分 $V_1, \ldots, V_N$，满足

$$\widetilde{\mu}(V_i) = \frac{1}{N}, \quad c \le \frac{\mathrm{d}\widetilde{\mu}}{\mathrm{d}\mu} \le C, \quad \sup_{x\in V_i} d_{\mathcal{M}}(x,x_i) \le \eta_0 r. \tag{103}$$

每一个满足

$$\mathbf{1}_{\{|x_i-x_j|\le \alpha r\}} \le A_{ij} \le \mathbf{1}_{\{|x_i-x_j|\le \beta r\}} \tag{104}$$

则在 $K=Nr^m$ 和 $\delta_N = C_\delta r$下满足(24)–(26) 。这些常数对所有满足(104)的图都是一致的。

证明。令 $b=\eta_0 r/4$。在($\mathcal{M}$ $d_{\mathcal{M}}$)中选取一个确定性的极大严格 b-分离集$\{y_1,\ldots,y_J\}$，并令 $U_1,\ldots,U_J$为相应的沃罗诺伊胞，其中并列情形按中心的顺序加以解决。每个 U_ℓ 都包含以 y_ℓ 为中心、半径为 $b/2$ 的开球，并且包含于半径为 b的闭球中。由(100)和(7),

$$\mu(U_\ell) \asymp b^m, \quad \nu(U_\ell)\asymp b^m, \quad J \le Cb^{-m}. \tag{105}$$

令 $M_\ell = \#\{i : x_i \in U_\ell\}$。由于集合 U_ℓ 是确定性的，(7)表明 M_ℓ 服从均值为 $N\nu(U_\ell)$的二项分布。乘法型切尔诺夫界给出

$$\mathbb{P}\left(M_\ell \notin [N\nu(U_\ell)/2, 2N\nu(U_\ell)]\right) \le 2e^{-cN\nu(U_\ell)}.$$

取并集界并利用(105)，我们得到

$$\mathbb{P}\left(\text{some } M_\ell \notin [N\nu(U_\ell)/2, 2N\nu(U_\ell)]\right) \le Cb^{-m}e^{-cNb^m} \le Cr^{-m}e^{-cK}.$$

令$\mathcal{E}_{N,\,r}$ 表示补事件。在该事件中，每个单元均非空。定义

$$\frac{\mathrm{d}\widetilde{\mu}}{\mathrm{d}\mu}(x) := \frac{M_\ell}{N\mu(U_\ell)} \quad \text{for } x\in U_\ell. \tag{106}$$

由于 $\sum_{\ell=1}^{J} M_\ell = N$，这定义了一个概率测度。此外，根据$\mathcal{E}_{N,\ r}$的定义以及（7），

$$\frac{\rho_{\min}}{2} \le \frac{\mathrm{d}\widetilde{\mu}}{\mathrm{d}\mu} \le 2\rho_{\max} \quad \mu\text{-a.e.}$$

由于 μ 是无原子的，我们可以将每个 U_ℓ 划分为 M_ℓ 个具有相同 μ-测度的可测集，并将其中一个分配给 U_ℓ中的每个样本点。将分配给 x_i 的集合记为 V_i。于是 $\mu(V_i) = \mu(U_\ell)/M_\ell$，因此由（106）得到 $\widetilde{\mu}(V_i) = 1/N$。此外，如果 $x \in V_i$，则 x 和 x_i都属于 U_ℓ，从而 $d_{\mathcal{M}}(x,\ x_i) \le 2b \le \eta_0 r$。这就证明了（103）。

定义 $F(x) = x_i$，其中 $x \in V_i$。对于每个 $x \in \mathcal{M}$ 和 $R > \eta_0 r$，

$$c\mu(B_{\mathcal{M}}(x, R-\eta_0 r)) \le \frac{1}{N}\#\{i : d_{\mathcal{M}}(x, x_i) \le R\} \le C\mu(B_{\mathcal{M}}(x, R+\eta_0 r)). \tag{107}$$

由于 $\widetilde{\mu}(V_i) = 1/N$，（107）中的中间量等于 $\widetilde{\mu}(F^{-1}(B_{\mathcal{M}}(x,\ R)))$。此外，$d_{\mathcal{M}}(y,\ F(y)) \le \eta_0 r$ 意味着

$$B_{\mathcal{M}}(x, R-\eta_0 r) \subseteq F^{-1}(B_{\mathcal{M}}(x,R)) \subseteq B_{\mathcal{M}}(x, R+\eta_0 r).$$

第一个包含关系对 $R > \eta_0 r$成立，而第二个对每个 $R > 0$成立。现在对 $\mathrm{d}\widetilde{\mu}/\mathrm{d}\mu$的界定给出了（107）。

接下来证明度量比较。减小 r_0，使得 $\beta r_0 \le \ell_0$。将 (101) 应用于图路径的每条边，可得

$$d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j) \le \kappa_0 d_N(i,j) \tag{108}$$

只要存在路径，

反过来，固定 $i,\ j$，并令 $D_0 = d_{\mathcal{M}}(x_i,\ x_j)$。若 $D_0 \le \alpha r$，则 $|x_i - x_j| \le \alpha r$，因此存在一条直接边。否则，令 $\gamma :\ [0, D_0] \to \mathcal{M}$ 为一条从x_i 到 x_j的最短测地线。设 $L = \lceil 4D_0/(\alpha r) \rceil$，并考虑这些点

$$y_k = \gamma(kD_0/L), \quad 0 \le k \le L.$$

由于集合 U_ℓ 覆盖$\mathcal{M}$，每个集合都至少包含一个样本点，且直径至多为 $2b$，因此我们可以在每个 y_k附近选取一个距离不超过 $2b$的样本点。在端点处，保留 x_i 和x_j。

相邻选取的样本点之间的测地距离至多为

$$\frac{D_0}{L} + 4b \le \frac{\alpha r}{4} + 4b < \alpha r,$$

只要 η_0 足够小。于是，相邻样本点之间都有一条边；去掉重复顶点后，它们构成一条图路径。这条路径的总长度至多为

$$D_0 + 4bL \le CD_0,$$

这里我们使用了 $D_0 > \alpha r$。因此，图是连通的，并且 $d_N(i,\ j) \le C d_{\mathcal{M}}(x_i,\ x_j)$。结合 (108)，这就证明了 (24) 中的度量部分，并界定了图直径。

度量比较和 (107) 蕴含

$$\mu_N(B_N(i,R)) \le C(R + C\eta_0 r)^m$$

对于每个 $R > 0$。它们还给出 $\mu_N(B_N(i,\ R)) \ge cR^m$对于 $C_\delta r \le R \le R_0$，在增大C_δ 并选择固定的 R_0 之后。最后，根据 (104)，d_i 下界为 $B_{\mathcal{M}}(x_i,\ \alpha r)$ 中的样本数量，上界为 $B_{\mathcal{M}}(x_i,\ \kappa_0\beta r)$ 中的样本数量。方程 (107) 和 (100) 给出 $cK \le d_i \le CK$。η_0 和 r_0 的所有选择仅取决于固定参数，正如所要求的。

□

引理 B.2。 回顾一下， R_i 表示从 x_i 到其第 k个最近邻的环境欧几里得距离。存在正的结构常数 α、β、 r_0、 c ，使其具有以下性质。如果 $r = (k/N)^{1/m} \le r_0$，则以至少 $1 - 2Ne^{-ck}$ 的概率，

$$\alpha r < R_i \le \beta r \quad (1 \le i \le N), \tag{109}$$

且(104) 对 A^k成立。

证明。 根据 (7)、(100) 和 (101)，存在 $c_1, C_1, R_1 > 0$ ，使得

$$c_1 R^m \le \nu\{y : |y - x| \le R\} \le C_1 R^m, \quad x \in \mathcal{M}, \ \ 0 < R \le R_1.$$

在给定 $x_i = x$的条件下，我们有

$$\#\{j \ne i : |x_j - x| \le R\} \sim \mathrm{Bin}(N-1, \nu\{y : |y - x| \le R\}).$$

选取足够小的 $\alpha > 0$ ，使得 $C_1\alpha^m \le 1/4$；再选取足够大的 $\beta > 0$ ，使得$c_1\beta^m \ge 8$。减小 r_0 ，使得 $\beta r_0 \le R_1$。由于 $r^m = k/N$ 且 $(N-1)/N \ge 1/2$，我们有

$$(N-1)\nu\{y : |y - x| \le \alpha r\} \le k/4, \quad (N-1)\nu\{y : |y - x| \le \beta r\} \ge 4k.$$

因此，Chernoff 界对 x一致地给出：

$$\mathbb{P}(\#\{j \ne i : |x_j - x_i| \le \alpha r\} \ge k \mid x_i = x) \le e^{-ck},$$

and

$$\mathbb{P}(\#\{j \ne i : |x_j - x_i| \le \beta r\} < k \mid x_i = x) \le e^{-ck}.$$

对 x_i 积分，并对 i 应用并集界，可知以至少 $1 - 2Ne^{-ck}$的概率， $\alpha r < R_i \le \beta r$ 对所有 i同时成立。这就证明了 (109)。

在此事件上， $|x_i - x_j| \le \alpha r$ 与 $j \ne i$ 蕴含 $j \in \mathcal{N}_k(i)$，而 $j \in \mathcal{N}_k(i)$蕴含$|x_i - x_j| \le \beta r$。因此，即使出现距离并列情形，(104) 对于 A^k仍成立。 □

B.1.2 局部图随机游走的热核

现在，我们建立分析行列式投影所需的热核估计。我们的方法是利用引理 B.1 中构造的划分，将图上的随机游走表示为底层流形上的可逆马尔可夫核。首先，我们为底层流形上的局部马尔可夫核建立高斯估计，再利用附录 B 中构造的划分，将这些估计转移到离散图随机游走上。随后，我们通过泊松表示，将离散时间随机游走过渡到连续时间热半群。

对于测度度量空间 (Y, d_Y, λ)，令 $V_Y(x, R) = \lambda(B_Y(x, R))$，并定义

$$|\nabla_b u|^2(x) := \frac{1}{V_Y(x, b)} \int_{B_Y(x,b)} |u(y) - u(x)|^2 \, \mathrm{d}\lambda(y). \tag{110}$$

对于关于 λ 对称的马尔可夫核 p_1 ，如果满足以下条件，我们称 p_1 弱（b， b'）兼容：

$$\frac{c}{V_Y(x, b)} \mathbf{1}_{\{d_Y(x,y) \le b\}} \le p_1(x, y) \le \frac{C}{V_Y(x, b')} \mathbf{1}_{\{d_Y(x,y) \le b'\}}, \quad 0 < b \le b' < \infty. \tag{111}$$

我们首先回顾由 [10]，建立的高斯热核估计的一个推论，它将作为本附录的主要分析工具。

命题 B.3 ([10], 定理 9.10 和引理 4.11 和 4.16)**.** 设 (Y, d_Y, λ) 是一个具有体积倍增性质、直径无限的完备测地度量测度空间。假设对于某个固定的 $b > 0$，存在常数 $C, \Lambda > 0$，使得

$$\int_D |u - u_D|^2 \, \mathrm{d}\lambda \le CR^2 \int_{\Lambda D} |\nabla_b u|^2 \, \mathrm{d}\lambda, \quad D = B_Y(x, R), \quad R \ge b. \tag{112}$$

这里 u_D 表示 D上 u 的平均值，而 $\Lambda D = B_Y(x, \Lambda R)$。

*I*若 f p_1 是满足 (111) 的对称马尔可夫核，则其迭代密度满足 y

$$p_j(x, y) \le \frac{C_1}{V_Y(x, \sqrt{j})} \exp\left(-c_1 \frac{d_Y(x, y)^2}{j}\right), \tag{113}$$

$$p_j(x, y) \ge \frac{c_2}{V_Y(x, \sqrt{j})} \exp\left(-C_2 \frac{d_Y(x, y)^2}{j}\right), \quad d_Y(x, y) \le c_3 j, \tag{114}$$

对所有整数 $j \ge j_0$均成立，其中 j_0，且这些估计中的常数仅取决于体积倍增常数和庞加莱常数、 b、 b' 以及 (111) 中的常数。

我们说明前述表述如何由 [10]得出。按照该论文的术语，若对称马尔可夫核 p_1 满足双侧局部性界 (111)，并且还存在 $\alpha > 0$ 使得

$$p_2(x, y) \ge \alpha p_1(x, y),$$

其中 p_2 表示两步转移密度。仅满足对称性和局部性条件的核称为弱 (b, b')-相容核。

[10] 中的定理 9.10 在更强的相容性假设下建立了高斯估计。为将此结果应用于弱相容核，我们使用引理 4.11；该引理表明，如果空间对某个 $b_0 < b$ 是拟-b_0-测地的，那么足够大的卷积幂 p_k 就是相容的。由于每个测地空间都满足这一条件，定理 9.10 可应用于 p_k，并给出其迭代的高斯界。最后，引理 4.16 将这些界传回原核 p_1，从而得到所述结论。

引理 B.4. 设 σ 是 M 上满足以下条件的概率测度

$$c_0 \le \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\mu} \le C_0$$

对于 s $0 < c_0 \le C_0 < \infty$。假设一个 σ-对称马尔可夫核 p 1
满足*ties*

$$c_1 r^{-m} \mathbf{1}_{\{d_{\mathcal{M}}(x,y) \le br\}} \le p_1(x, y) \le C_1 r^{-m} \mathbf{1}_{\{d_{\mathcal{M}}(x,y) \le b'r\}} \tag{115}$$

对于固定的 c_1、$C_1 > 0$ 和 $0 < b \le b'$。那么存在 $r_0 > 0$、一个整数 $j_0 \ge 1$以及常数 c、C、$c' > 0$，使得对于每个 $0 < r \le r_0$，迭代核满足

$$p_j(x, y) \le \frac{C}{\min\{(r\sqrt{j})^m, 1\}} \exp\left(-c \frac{d_{\mathcal{M}}(x, y)^2}{r^2 j}\right), \quad j \ge 1, \tag{116}$$

$$p_j(x, y) \ge \frac{c}{\min\{(r\sqrt{j})^m, 1\}} \exp\left(-C \frac{d_{\mathcal{M}}(x, y)^2}{r^2 j}\right), \quad j \ge j_0, \quad d_{\mathcal{M}}(x, y) \le c' r j. \tag{117}$$

这些估计对 $\sigma \otimes \sigma$ 几乎处处成立，其中的常数仅依赖于 $(M\ g)$、c_0、C_0、c_1、C_1、b 和 b'，与 r、σ 和 p_1 无关。

证明。 我们在乘积空间 $(Y_r,\ d_r,\ \lambda)$ 上验证命题 B.3 的假设，其中

$$Y_r := (\mathcal{M}, g_r)\times\mathbb{R},\quad d_r((x,z),(y,w)) := \sqrt{r^{-2}d_{\mathcal{M}}(x,y)^2+|z-w|^2},\quad \lambda := \sigma\otimes\mathrm{Leb}, \tag{118}$$

其中 $g_r = r^{-2}g$。与 $\mathbb{R}$ 的乘积确保 Y_r 具有无限直径，这正如命题 B.3 所要求的。除非另有说明，Y_r 上的梯度均相对于乘积度量取值，因此

$$|\nabla v|^2 = |\nabla_{g_r} v|^2 + |\partial_z v|^2 = r^2|\nabla_g v|^2 + |\partial_z v|^2.$$

体积倍增。 Y_r 空间是完备且测地的。此外，Y_r 中半径为 R 的球包含半径为 $R/\sqrt{2}$ 的因子球的乘积，并包含于半径为 R 的因子球的乘积中。利用 (100) 以及 $\bar{\mathrm{d}}\sigma/\mathrm{d}\mu$ 的界定，我们得到

$$\lambda(B_{d_r}((x,z),R)) \asymp R\min\{(rR)^m, 1\}. \tag{119}$$

比较常数仅依赖于 $(\mathcal{M}\ g)$ 和 $c_0,\ C_0$，而与 r 和 σ 无关。特别地，Y_r 满足体积倍增，且具有一致的常数。

紧因子上的庞加莱不等式：对于可测集 $A\subseteq\mathcal{M}$，若其测度为正，记

$$w_{A,\sigma} := \frac{1}{\sigma(A)}\int_A w\ \mathrm{d}\sigma,\quad w_{A,\mu} := \frac{1}{\mu(A)}\int_A w\ \mathrm{d}\mu.$$

选取小于 $\mathcal{M}$ 的单射半径的 $\rho_*>0$。如有必要，减小 ρ_*，则在 $B_{\mathcal{M}}(x,\rho_*)$ 上的正规坐标中，度量系数和体积密度与其欧几里得对应物一致可比，且与 x 无关。因此，欧几里得庞加莱不等式给出

$$\int_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho)}|w-w_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho),\mu}|^2\ \mathrm{d}\mu \le C\rho^2\int_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho)}|\nabla_g w|^2\ \mathrm{d}\mu,\quad 0<\rho\le\rho_*.$$

由于平均值使到常数的 L^2 距离最小，$\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\mu$ 上的界定意味着

$$\begin{aligned}\int_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho)}|w-w_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho),\sigma}|^2\ \mathrm{d}\sigma &\le \int_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho)}|w-w_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho),\mu}|^2\ \mathrm{d}\sigma\\ &\le C_0\int_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho)}|w-w_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho),\mu}|^2\ \mathrm{d}\mu \le C\rho^2\int_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho)}|\nabla_g w|^2\ \mathrm{d}\sigma.\end{aligned}$$

对于更大的半径，我们在紧致、连通流形 $\mathcal{M}$ 上使用全局庞加莱不等式。通过同样的测度比较，

$$\int_{\mathcal{M}}|w-w_{\mathcal{M},\sigma}|^2\ \mathrm{d}\sigma \le C\int_{\mathcal{M}}|\nabla_g w|^2\ \mathrm{d}\sigma.$$

取 $\Lambda_{\mathcal{M}}>1$ 使得 $\Lambda_{\mathcal{M}}\rho_*>\mathrm{diam}(\mathcal{M})$。对于 $\rho\ge\rho_*$，球 $B_{\mathcal{M}}(x,\Lambda_{\mathcal{M}}\rho)$ 包含整个$\mathcal{M}$。因此，

$$\begin{aligned}\int_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho)}|w-w_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho),\sigma}|^2\ \mathrm{d}\sigma \le \int_{\mathcal{M}}|w-w_{\mathcal{M},\sigma}|^2\ \mathrm{d}\sigma &\le C\int_{\mathcal{M}}|\nabla_g w|^2\ \mathrm{d}\sigma\\ &\le C\rho^2\int_{B_{\mathcal{M}}(x,\Lambda_{\mathcal{M}}\rho)}|\nabla_g w|^2\ \mathrm{d}\sigma,\end{aligned}$$

其中，最后一个不等式中的常数包含固定因子 ρ_*^{-2}。结合 ρ 的两个值域，我们得到

$$\int_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho)} |w - w_{B_{\mathcal{M}}(x,\rho),\sigma}|^2 \, \mathrm{d}\sigma \le C\rho^2 \int_{B_{\mathcal{M}}(x,\Lambda_{\mathcal{M}}\rho)} |\nabla_g w|^2 \, \mathrm{d}\sigma, \quad \rho > 0. \tag{120}$$

令 $B_r(x,R)$ 表示 $(\mathcal{M}, g_r)$ 中的球。由于 $B_r(x,R) = B_{\mathcal{M}}(x,rR)$ 且 $|\nabla_{g_r} w|^2 = r^2|\nabla_g w|^2$，(120) 变为

$$\int_{B_r(x,R)} |w - w_{B_r(x,R),\sigma}|^2 \, \mathrm{d}\sigma \le CR^2 \int_{B_r(x,\Lambda_{\mathcal{M}}R)} |\nabla_{g_r} w|^2 \, \mathrm{d}\sigma, \quad R > 0. \tag{121}$$

这些常数与 r 和 σ 无关。特别地，对于超过直径 $\operatorname{diam}(\mathcal{M})/r$ 的半径，该估计同样成立：在此范围内，紧致因子就是整个$\mathcal{M}$，而重新缩放后的全局庞加莱常数的阶为 $r^{-2} \lesssim R^2$。

积空间球上的庞加莱不等式。 接下来我们将 (121) 扩展到乘积空间 Y_r 中的球。固定 $\xi_0 = (x_0, z_0) \in Y_r$ 和 $R > 0$，并令

$$D = B_{d_r}(\xi_0, R), \quad B = B_r(x_0, R), \quad B^+ = B_r(x_0, \Lambda_{\mathcal{M}} R),$$

以及 $I = (z_0 - R, z_0 + R)$。记 $Q = B \times I$ 和 $Q^+ = B^+ \times I$。由 $\Lambda = (\Lambda_{\mathcal{M}}^2 + 1)^{1/2}$，我们有

$$D \subseteq Q \subseteq Q^+ \subseteq \Lambda D.$$

对于定义在 Y_r 上的光滑函数 v，定义

$$a(t) := \frac{1}{\sigma(B)} \int_B v(y,t) \, \mathrm{d}\sigma(y), \quad v_Q := \frac{1}{\lambda(Q)} \int_Q v \, \mathrm{d}\lambda = \frac{1}{|I|} \int_I a(t) \, \mathrm{d}t.$$

由于 $\int_B (v(y,t) - a(t)) \, \mathrm{d}\sigma(y) = 0$，展开平方可得

$$\int_Q |v - v_Q|^2 \, \mathrm{d}\lambda = \int_I \int_B |v(y,t) - a(t)|^2 \, \mathrm{d}\sigma(y) \, \mathrm{d}t + \sigma(B) \int_I |a(t) - v_Q|^2 \, \mathrm{d}t.$$

根据（121），第一项可界定为

$$CR^2 \int_I \int_{B^+} |\nabla_{g_r} v(y,t)|^2 \, \mathrm{d}\sigma(y) \, \mathrm{d}t.$$

对于第二项，由一维庞加莱不等式和柯西–施瓦茨不等式可得

$$\sigma(B) \int_I |a(t) - v_Q|^2 \, \mathrm{d}t \le CR^2 \sigma(B) \int_I |a'(t)|^2 \, \mathrm{d}t \le CR^2 \int_I \int_B |\partial_t v(y,t)|^2 \, \mathrm{d}\sigma(y) \, \mathrm{d}t,$$

其中

$$a'(t) = \frac{1}{\sigma(B)} \int_B \partial_t v(y,t) \, \mathrm{d}\sigma(y).$$

结合这些界定，我们得到

$$\int_Q |v - v_Q|^2 \, \mathrm{d}\lambda \le CR^2 \int_{Q^+} |\nabla v|^2 \, \mathrm{d}\lambda.$$

记 v_D 为在 D 上的 λ-平均值，则平均值的极小化性质以及上述包含关系给出

$$\int_D |v - v_D|^2 \, \mathrm{d}\lambda \le \int_D |v - v_Q|^2 \, \mathrm{d}\lambda \le \int_Q |v - v_Q|^2 \, \mathrm{d}\lambda \le CR^2 \int_{\Lambda D} |\nabla v|^2 \, \mathrm{d}\lambda.$$

这对所有 $R > 0$ 都成立，其中常数与 r 和 σ 无关。

平滑核的构造：为获得命题 B.3 中的非局部庞加莱不等式，我们在 Y_r 上使用局部平滑算子。固定 $b_1 := \frac{1}{2}\min\{b,1\}$ 和 $b_0 := \frac{b_1}{2}$。

Y_r 的单射半径为 $r^{-1}\,\mathrm{inj}(\mathcal{M}\ g)$。我们选取足够小的 $r_0 > 0$，使得只要 $0 < r \le r_0$，该半径就大于 $2b_0$。

令 $\chi \in C^\infty([0,\infty))$ 为满足以下条件的光滑截断函数：$0 \le \chi \le 1$, $\chi = 1$ 在 $[0,1/4]$ 上成立，且 $\chi =$ 在 $[1,\infty)$ 上为 0。对于 $\zeta \in Y_r$，定义

$$\Phi(\xi,\zeta) := \chi\left(\frac{d_r(\xi,\zeta)^2}{b_0^2}\right), \quad A(\xi) := \int_{Y_r} \Phi(\xi,\zeta)\ \mathrm{d}\lambda(\zeta), \text{ and } J(\xi,\zeta) := \frac{\Phi(\xi,\zeta)}{A(\xi)}.$$

函数 Φ 是光滑的，因为在所选单射半径范围内，距离平方是光滑的，并且截断函数在到达割迹之前就已变为零。

Put

$$V_\xi := \lambda(B_{d_r}(\xi, b_0)).$$

根据 χ 的性质和体积倍增，

$$\lambda(B_{d_r}(\xi, b_0/2)) \le A(\xi) \le V_\xi, \quad cV_\xi \le A(\xi) \le V_\xi.$$

此外，

$$|\nabla_\xi \Phi(\xi,\zeta)| \le \frac{C}{b_0}\mathbf{1}_{\{d_r(\xi,\zeta)<b_0\}}.$$

由于 Φ 的紧支集以及 σ 的有界密度，可以在局部对积分号下求导。因此，

$$\nabla A(\xi) = \int_{Y_r} \nabla_\xi \Phi(\xi,\zeta)\ \mathrm{d}\lambda(\zeta), \quad |\nabla A(\xi)| \le \frac{C}{b_0} V_\xi.$$

应用商法则，

$$\nabla_\xi J(\xi,\zeta) = \frac{\nabla_\xi \Phi(\xi,\zeta)}{A(\xi)} - \frac{\Phi(\xi,\zeta)\nabla A(\xi)}{A(\xi)^2}.$$

因此，

$$\int_{Y_r} J(\xi,\zeta)\ \mathrm{d}\lambda(\zeta) = 1, \quad 0 \le J(\xi,\zeta) \le \frac{C}{V_\xi}\mathbf{1}_{\{d_r(\xi,\zeta)<b_0\}}, \quad |\nabla_\xi J(\xi,\zeta)| \le \frac{C}{b_0 V_\xi}\mathbf{1}_{\{d_r(\xi,\zeta)<b_0\}}. \tag{122}$$

注意，导数只作用于 Φ 及其积分 A。特别地，无需对 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\mu$ 的正则性作任何要求，只需其有界即可。

非局部庞加莱不等式。对于 $u \in L^2_{\mathrm{loc}}(Y_r,\ \lambda)$，定义

$$Su(\xi) := \int_{Y_r} J(\xi,\zeta)u(\zeta)\ \mathrm{d}\lambda(\zeta).$$

J 的光滑性和紧支集性质意味着 Su 是光滑的。根据（122）和詹森不等式，

$$\begin{aligned}|u(\xi) - Su(\xi)|^2 \le \int_{Y_r} J(\xi,\zeta)|u(\zeta)-u(\xi)|^2\ \mathrm{d}\lambda(\zeta) &\le \frac{C}{V_\xi}\int_{B_{d_r}(\xi,b_0)} |u(\zeta)-u(\xi)|^2\ \mathrm{d}\lambda(\zeta) \\ &= C|\nabla_{b_0} u|^2(\xi).\end{aligned}$$

另一方面，对（122）中的第一个恒等式求导可得

$$\int_{Y_r} \nabla_\xi J(\xi,\zeta)\ \mathrm{d}\lambda(\zeta) = 0.$$

因此，

$$\nabla Su(\xi) = \int_{Y_r} \nabla_\xi J(\xi,\zeta)(u(\zeta)-u(\xi))\ \mathrm{d}\lambda(\zeta).$$

由 (122) 和柯西–施瓦茨不等式，

$$\begin{aligned}|\nabla Su(\xi)|^2 &\le \frac{C}{b_0^2 V_\xi^2}\left(\int_{B_{d_r}(\xi,b_0)} |u(\zeta)-u(\xi)|\ \mathrm{d}\lambda(\zeta)\right)^2 \\ &\le \frac{C}{b_0^2 V_\xi}\int_{B_{d_r}(\xi,b_0)} |u(\zeta)-u(\xi)|^2\ \mathrm{d}\lambda(\zeta) = \frac{C}{b_0^2}|\nabla_{b_0}u|^2(\xi).\end{aligned}$$

由于 b_0 是固定的，我们已证明

$$|u-Su|^2 + |\nabla Su|^2 \le C|\nabla_{b_0}u|^2, \tag{123}$$

其中常数与 r 和 σ 无关。

令 $D = B_{d_r}(\xi_0,\ R)$，其中 $R \ge b_1$。将 (122) 应用于 Su，再应用 (123)，得到

$$\begin{aligned}\int_D |u-u_D|^2\ \mathrm{d}\lambda \le \int_D |u-(Su)_D|^2\ \mathrm{d}\lambda &\le 2\int_D |u-Su|^2\ \mathrm{d}\lambda + 2\int_D |Su-(Su)_D|^2\ \mathrm{d}\lambda \\ &\le C\int_D |\nabla_{b_0}u|^2\ \mathrm{d}\lambda + CR^2\int_{\Lambda D}|\nabla Su|^2\ \mathrm{d}\lambda \le C\left(1+\frac{R^2}{b_0^2}\right)\int_{\Lambda D}|\nabla_{b_0}u|^2\ \mathrm{d}\lambda \\ &\le CR^2\int_{\Lambda D}|\nabla_{b_0}u|^2\ \mathrm{d}\lambda.\end{aligned}$$

在最后一个不等式中，我们用到了 $R \ge b_1 = 2b_0$。

由于 $b_1 = 2b_0$，体积倍增也给出

$$|\nabla_{b_0}u|^2(\xi) \le \frac{\lambda(B_{d_r}(\xi,b_1))}{\lambda(B_{d_r}(\xi,b_0))}|\nabla_{b_1}u|^2(\xi) \le C|\nabla_{b_1}u|^2(\xi).$$

结合前面的估计，我们得到

$$\int_D |u-u_D|^2\ \mathrm{d}\lambda \le CR^2\int_{\Lambda D}|\nabla_{b_1}u|^2\ \mathrm{d}\lambda, \quad R \ge b_1.$$

这恰好是尺度 b_1 下的 (112)，其中常数关于 r 和 σ 一致。

应用于乘积核。现在我们在 Y_r 上构造一个马尔可夫核，以便应用命题 B.3。令

$$q_1(z,w) := \frac{1}{2}\mathbf{1}_{\{|z-w|\le 1\}},$$

并定义

$$\widehat{p}_1((x,z),(y,w)) := p_1(x,y)q_1(z,w). \tag{124}$$

该核关于 λ 对称且满足马尔可夫性质。根据（115），只要 $d_r((x,\ z),\ (y,\ w)) \le b_1$，它就有一个正数倍的 r^{-m} 作为下界。此外，除非

$$d_r((x,z),(y,w)) \le b_2, \quad b_2 := \sqrt{(b')^2+1},$$

并且它有一个常数倍的 r^{-m} 作为上界。当 r 足够小时，（119）给出

$$\lambda(B_{d_r}(\xi, b_i)) \asymp r^m, \quad i = 1, 2.$$

因此， $\widehat{p}_1$ 满足内半径为 b_1 、外半径为 b_2的 (111)。结合体积倍增以及上述建立的非局部庞加莱不等式，这验证了命题 B.3 的假设对 r 和 σ一致成立。

迭代乘积核可分解为

$$\widehat{p}_j((x, z), (y, w)) = p_j(x, y)q_j(z, w).$$

一维庞加莱不等式和相同的平滑论证验证了 q_1 在 $\mathbb{R}$上满足命题 B.3 的假设。因此,

$$q_j(0, 0) \asymp j^{-1/2}, \quad j \geq j_0,$$

增大 j_0，使得 $j_0 \geq 2$成立之后。高斯估计最初几乎处处成立，由于 q_j 关于 $j \geq 2$连续，因此可延拓至 (0，0)。

将命题 B.3 应用于 $\widehat{p}_j$，可得 Y_r上的高斯估计。由 (119),

$$\lambda(B_{d_r}((x, 0), \sqrt{j})) \asymp \sqrt{j} \min\{(r\sqrt{j})^m, 1\}.$$

利用分解式 $\widehat{p}_j((x, 0),(y, 0)) = p_j(x, y)q_j(0, 0)$ 和 $q_j(0, 0) \asymp j^{-1/2}$， $\widehat{p}_j$ 的高斯界给出 $j \geq j_0$的 (116) 和 (117)。

我们说明为何可以在 $\widehat{p}_j$ 处取值来评估这些估计。固定 $j \geq j_0$。根据富比尼定理，对于 $\sigma \otimes \sigma$-几乎处处的 (x, y)，关于 $\widehat{p}_j((x, z),(y, w))$ 的估计对几乎所有 $(z, w) \in \mathbb{R}^2$成立。对每个这样的 (x, y)，选取一个趋于(0,0)的序列 $(z_k, w_k) \to$，使这些估计成立。由于 $\widehat{p}_j((x, z_k), (y, w_k)) = p_j(x, y)q_j(z_k, w_k)$，且 q_j 对于 $j \geq 2$在(0, 0)处连续，我们可以令 $k \to \infty$。体积比较 (119) 对 z_k, w_k一致，因此上界在取极限后仍成立。

对于下界，固定 $0 < c' < c_3$，其中 c_3 在(114)中定义。若 $d_{\mathcal{M}}(x, y) \leq c'rj$，则

$$d_r((x, 0), (y, 0)) = \frac{d_{\mathcal{M}}(x, y)}{r} \leq c'j < c_3 j.$$

由 d_r 的连续性，对于充分接近 (0,0) 的 (z, w)，条件 (114) 也成立。因此，我们可以像上面一样取极限，得到 (117)。

对 $j \geq j_0$ 取可数交集，可得一个共同的满 $\sigma \otimes \sigma$ 测度集合，在该集合上，(116) 和 (117) 对每个 $j \geq j_0$ 都成立。

还需证明有限多个整数 $1 \leq j < j_0$ 对应的上界。由马尔可夫性质和 (115),

$$p_j(x, y) \leq C_1 r^{-m}.$$

此外，$p_j(x, y) = 0$ 除非 $d_{\mathcal{M}}(x, y) \leq jb'r$。在此支撑集上,

$$\frac{d_{\mathcal{M}}(x, y)^2}{r^2 j} \leq j(b')^2 \leq j_0(b')^2.$$

由于

$$\frac{1}{\min\{(r\sqrt{j})^m, 1\}} \geq r^{-m} j^{-m/2},$$

增大 (116) 中的 C，即可为 j 的其余取值建立相同的上界。由此完成证明。

□

现在，我们将引理 B.4 的高斯估计推广到图上的局部随机游走。我们使用引理 B.1 中构造的事件 $\mathcal{E}_{N,\,r}$ 以及划分 $V_1,\ \ldots,\ V_N$。回顾引理 B.1，它给出了 $\mathcal{M}$ 上的一个概率测度 $\tilde{\mu}$，满足 $\tilde{\mu}(V_i) = 1/N$，对所有 $1 \le i \le N$ 均成立。

引理 B.5. 设 $P \in \mathbb{R}^{N\times N}$ 是关于概率向量 $\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_N)$ 可逆的随机矩阵。假设对于固定的 $0 < \alpha \le \beta$ 和正数常数 c, C，有

$$\frac{c}{N} \le \omega_i \le \frac{C}{N}, \quad \frac{c}{Nr^m}\mathbf{1}_{\{|x_i - x_j| \le \alpha r\}} \le P_{ij} \le \frac{C}{Nr^m}\mathbf{1}_{\{|x_i - x_j| \le \beta r\}}, \tag{125}$$

并且这些不等式对所有 $1 \le i, j \le N$（包括 $i = j$）均成立。

如果将引理 *B.1* 中的 η_0 选得足够小，则存在一个整数 $j_0 \ge 1$ 以及常数 $c_0, c, C > 0$，使得在 $E_{N,r}$ 上，P 的迭代满足

$$(P^j)_{uv} \le \frac{C}{N \min\{(r\sqrt{j})^m, 1\}} \exp\left(-c\frac{d_{\mathcal{M}}(x_u, x_v)^2}{r^2 j}\right), \quad j \ge 1, \tag{126}$$

$$(P^j)_{uv} \ge \frac{c}{N \min\{(r\sqrt{j})^m, 1\}} \exp\left(-C\frac{d_{\mathcal{M}}(x_u, x_v)^2}{r^2 j}\right), \quad j \ge j_0, \quad d_{\mathcal{M}}(x_u, x_v) \le c_0 r j. \tag{127}$$

这些估计对所有顶点 u, v 均成立，其中常数仅取决于 (125) 中的固定参数和结构数据。

证明. 我们首先将离散图游走表示为 $\mathcal{M}$ 上的马尔可夫核。设 $\tilde{\mu}$ 和 $V_1, \ldots, V_N$ 如引理 B.1 中所述，并定义

$$\mathrm{d}\sigma(x) := N\omega_i \mathrm{d}\tilde{\mu}(x) \text{ for } x \in V_i, \text{ and } p_1(x, y) := \frac{P_{ij}}{\omega_j} \text{ for } x \in V_i,\ y \in V_j. \tag{128}$$

由于 $\tilde{\mu}(V_i) = 1/N$，我们有 $\sigma(V_i) = \omega_i$，因此 σ 是一个概率测度。此外，(103) 和 (125) 意味着

$$c \le \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\mu} \le C.$$

根据 P 的可逆性，$P_{ij}/\omega_j = P_{ji}/\omega_i$，因此 p_1 关于 σ 对称。此外，对于 $x \in V_i$，

$$\int_{\mathcal{M}} p_1(x, y)\ \mathrm{d}\sigma(y) = \sum_{j=1}^{N} \frac{P_{ij}}{\omega_j}\sigma(V_j) = \sum_{j=1}^{N} P_{ij} = 1.$$

因此，p_1 是一个 σ-对称马尔可夫核。

接下来我们验证局部性界 (115)。对于 $x \in V_i$ 和 $y \in V_j$，引理 B.1 中构造的划分给出

$$d_{\mathcal{M}}(x, x_i) \le \eta_0 r, \quad d_{\mathcal{M}}(y, x_j) \le \eta_0 r.$$

如果 $d_{\mathcal{M}}(x,\ y) \le \alpha r/2$ 且 $\eta_0 \le \alpha/4$，那么

$$|x_i - x_j| \le d_{\mathcal{M}}(x_i, x) + d_{\mathcal{M}}(x, y) + d_{\mathcal{M}}(y, x_j) \le \alpha r.$$

因此，（125）中的下界意味着

$$p_1(x, y) \ge cr^{-m}.$$

反之，如果 $p_1(x,\ y) > 0$，那么 $P_{ij} > 0$，从而 $|x_i - x_j| \le \beta r$。根据（101），当 r 足够小时，

$$d_{\mathcal{M}}(x,y) \le d_{\mathcal{M}}(x,x_i) + d_{\mathcal{M}}(x_i,x_j) + d_{\mathcal{M}}(x_j,y) \le (\kappa_0\beta + 2\eta_0)r.$$

结合 (125) 中的上界，即可证明 (115)，其中 $b = \alpha/2$ 和 $b' = \kappa_0\beta + 2\eta_0$。该构造还给出了两个核的迭代之间的精确对应。事实上，由于 $\sigma(V_i) = \omega_i$，查普曼–科尔莫戈罗夫恒等式通过归纳法给出

$$p_j(x,y) = \frac{(P^j)_{uv}}{\omega_v}, \quad x \in V_u, \quad y \in V_v. \tag{129}$$

因此，我们可以将引理 B.4 应用于 p_j。对于 $x \in V_u$ 和 $y \in V_v$，由三角不等式可得

$$\left|d_{\mathcal{M}}(x,y) - d_{\mathcal{M}}(x_u,x_v)\right| \le 2\eta_0 r.$$

由上述不等式可得

$$\frac{d_{\mathcal{M}}(x,y)^2}{r^2 j} \ge \frac{d_{\mathcal{M}}(x_u,x_v)^2}{2r^2 j} - \frac{4\eta_0^2}{j}.$$

由于 $j \ge 1$，应用 (116) 和 (129)，其中 $\omega_v \asymp N^{-1}$，即可证明 (126)。

对于下界，令 $c' > 0$ 为 (117) 中的常数。取 $c_0 \le c'/2$，并在必要时增大j_0，使得当 $j \ge j_0$时始终有 $2\eta_0 \le c'j/2$。于是

$$d_{\mathcal{M}}(x_u,x_v) \le c_0 rj \quad \Longrightarrow \quad d_{\mathcal{M}}(x,y) \le c' rj$$

对于所有 $x \in V_u$ 和 $y \in V_v$均成立。应用 (117) 并利用 (129)，即可证明 (127)。

最后，引理 B.4 的估计在 $\sigma \otimes \sigma$-几乎处处成立。由于每个 $V_u \times V_v$都具有正的 $\sigma \otimes \sigma$ 测度，并且根据 (129)，p_j 在这些乘积上为常数，因此上述界定对每一对顶点 u，v均成立。证明完毕。

□

现在，我们利用泊松表示，将离散时间随机游走转化为其连续时间半群。引理 B.5 中得到的高斯估计，随后给出了连续时间转移概率的相应界定。

引理 B.6。 在引理 *B.5* 的假设下，定义

$$H_t := e^{-(t/r^2)(I-P)}, \quad u := t/r^2, \quad K := Nr^m. \tag{130}$$

对于任意固定的 $A_0 > 0$，存在 $C_{A_0} > 0$，使得当 $0 < t \le 1$ 且 $u \ge 1$时，

$$(H_t)_{ij} \le e^{-u}\mathbf{1}_{\{i=j\}} + \frac{C_{A_0}}{Nt^{m/2}}\left(1 + \frac{d_{\mathcal{M}}(x_i,x_j)}{\sqrt{t}}\right)^{-A_0}. \tag{131}$$

Mor此外，对于任意固定的 $a' > 0$，存在常数 $u_{a'}$、$c_{a'} > 0$，使得对于 $0 < t \le 1$，

$$u \ge u_{a'}, \quad d_{\mathcal{M}}(x_i,x_j) \le a'\sqrt{t} \quad \Longrightarrow \quad (H_t)_{ij} \ge \frac{c_{a'}}{Nt^{m/2}}. \tag{132}$$

最后，如果 $K \ge 1$ 且 $u \ge 2\log(eK)$，则 (131) 中的对角项 $e^{-u}\mathbf{1}_{\{i=j\}}$ 可以通过增大 C_{A_0} 吸收到第二项中。

证明。 根据指数级数，连续时间半群具有泊松表示

$$H_t = e^{-u}\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{u^\ell}{\ell!}P^\ell. \tag{133}$$

我们首先证明（131），单独处理项 $\ell = 0$ 。令 $R = d_{\mathcal{M}}(x_i,\ x_j)/r$。对于每个整数 $\ell \geq 1$, 我们有

$$1 + \frac{R}{\sqrt{u}} \leq \left(1 + \frac{R}{\sqrt{\ell}}\right)\left(1 + \sqrt{\frac{\ell}{u}}\right).$$

由于 $\exp(-cv^2)(1+v)^{A_0}$ 对于 $v \geq 0$一致有界，因此可得

$$e^{-cR^2/\ell} \leq C_{A_0}\left(1 + \frac{R}{\sqrt{u}}\right)^{-A_0}\left(1 + \sqrt{\frac{\ell}{u}}\right)^{A_0}. \tag{134}$$

设 J_u 为均值为 u的泊松随机变量。我们声称，对于 $u \geq$一致成立 1,

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{1}_{\{J_u \geq 1\}}\left(1 + \sqrt{J_u/u}\right)^{A_0}\right] \leq C_{A_0}, \tag{135}$$

$$\mathbb{E}\left[\mathbf{1}_{\{J_u \geq 1\}}(J_u/u)^{-m/2}\left(1 + \sqrt{J_u/u}\right)^{A_0}\right] \leq C_{A_0,m}. \tag{136}$$

为证明 (136)，根据 $J_u < u/2$ 或 $J_u \geq u/2$对期望进行划分。在$1 \leq J_u < u/2$上，被积函数由 $Cu^{m/2}$控制，而泊松下尾界给出

$$\mathbb{P}(J_u < u/2) \leq e^{-cu}.$$

因此，该事件的贡献对于 $u \geq 1$一致有界。在 $J_u \geq u/2$上，被积函数由 $(1 + J_u/u)^q$ 控制，其中某个固定整数 q。利用阶乘矩 $\mathbb{E}[(J_u)_k] = u^k$，我们得到

$$\sup_{u \geq 1} \mathbb{E}\left[(1 + J_u/u)^q\right] < \infty.$$

这就证明了 (136)。此外，由于对于任意整数$q \geq A_0/2$都有 $\left(1 + \sqrt{J_u/u}\right)^{A_0} \leq C_{A_0}($ $1 + J_u/u)^q$，前面的矩估计也证明了 (135)。

接下来，注意到

$$\frac{1}{\min\{(r\sqrt{\ell})^m, 1\}} \leq 1 + r^{-m}\ell^{-m/2}.$$

将 (126) 和 (134) 应用于 (133) 中的各项 $\ell \geq 1$ ，然后利用 (135) 和 (136)，可得

$$\begin{aligned} & e^{-u}\sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{u^\ell}{\ell!}(P^\ell)_{ij} \\ & \leq \frac{C_{A_0}}{N}\left(1 + \frac{R}{\sqrt{u}}\right)^{-A_0}\left(1 + r^{-m}u^{-m/2}\right) \\ & = \frac{C_{A_0}}{N}(1 + t^{-m/2})\left(1 + \frac{d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j)}{\sqrt{t}}\right)^{-A_0}. \end{aligned}$$

由于 $t \leq 1$，因子 $1 + t^{-m/2}$ 有界于 $2t^{-m/2}$。再加上来自 $\ell = 0$ 的贡献 $e^{-u}\mathbf{1}_{\{i=j\}}$，即可证明 (131)。

现在我们证明近对角线下界 (132)。将 (133) 中的求和限制在满足 $u/2 \leq \ell \leq 2u$ 的整数上。由于 $\mathbb{E}J_u = \mathrm{Var}(J_u) = u$，由切比雪夫不等式可得

$$\mathbb{P}\left(|J_u - u| > \frac{u}{2}\right) \leq \frac{4}{u}.$$

因此，对于 $u \geq 8$,

$$\mathbb{P}(u/2 \leq J_u \leq 2u) \geq \frac{1}{2}.$$

选取 $u_{a'}$ 充分大，使得当 $u \geq u_{a'}$时， $u/2 \geq j_0$ 且 $\overline{a}'\sqrt{u} \leq c_0 u/2$ 。若$d_{\mathcal{M}}(x_i,x_j) \leq a'\sqrt{t}$，则对每个 $u/2 \leq \ell \leq 2u$,

$$d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j) \leq a' r\sqrt{u} \leq c_0 r\ell.$$

因此，下界 (127) 在整个区间内均适用。此外，由于 $\ell \leq 2u$ 且$t = r^2 u$,

$$\min\{(r\sqrt{\ell})^m, 1\} \leq (2t)^{m/2}, \qquad \frac{d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j)^2}{r^2\ell} \leq 2(a')^2.$$

由此可得

$$(P^\ell)_{ij} \geq \frac{c}{Nt^{m/2}} e^{-C(a')^2}, \qquad u/2 \leq \ell \leq 2u.$$

将此估计代入 (133)，得到

$$\begin{aligned}(H_t)_{ij} &\geq \frac{c}{Nt^{m/2}} e^{-C(a')^2} \mathbb{P}(u/2 \leq J_u \leq 2u) \\ &\geq \frac{c_{a'}}{Nt^{m/2}},\end{aligned}$$

这就证明了 (132)。

最后，我们证明当 $u \geq 2\log(eK)$时，(131) 中的对角项可以吸收到第二项中。由于 $Nt^{m/2} = Ku^{m/2}$，我们有

$$Nt^{m/2} e^{-u} = Ku^{m/2} e^{-u} \leq C_m K e^{-u/2} \leq C_m.$$

因此,

$$e^{-u} \leq \frac{C_m}{Nt^{m/2}}.$$

由于式 (131) 中的距离因子在对角线上等于 1，因此只需增大 C_{A_0}，即可将第一项吸收到第二项中。 □

命题 B.7. 固定 $A_0 > 0$ 和 $a \geq 1$。在引理 *B.1* 的事件 $E_{N,r}$ 上，假设(104) 成立。则存在常数 C_*, $h_0 > 0$，使得(12)中定义的热半群 T_t 同时满足(27)–(29)，对所有满足以下条件的 h 均成立

$$C_* r^2 \log(eK) \leq h^2 \leq h_0^2. \tag{137}$$

这些常数的依赖关系如定理 *3.1* 所述，此外还依赖于固定参数 α, β。

证明。 将随机游走转移矩阵及其平稳分布定义为

$$P := D^{-1}A, \qquad \omega_i := \frac{d_i}{\sum_j d_j}. \tag{138}$$

由于 A是对称的， P 是关于 ω可逆的随机矩阵。由引理 B.1，度满足 $d_i \asymp K$，因此 $\omega_i \asymp N^{-1}$。结合 (104)，这验证了 (125)，故引理 B.6 的估计适用于 P。

对称归一化图拉普拉斯算子与随机游走拉普拉斯算子相似。更确切地说,

$$T_t = D^{1/2} H_t D^{-1/2}, \qquad (T_t)_{ij} = \sqrt{\frac{d_i}{d_j}}\,(H_t)_{ij}, \tag{139}$$

其中， H_t 在式 (130) 中定义。由于各度一致可比，引理 B.6 的界定可转移到 T_t，但常数有所调整。

我们首先证明 (27)。根据 (24)，在事件$\mathcal{E}_{N,r}$ 上，图距离 d_N 与测地距离 $d_{\mathcal{M}}$ 具有可比性。在 $t = h^2$ 和 $t = 2h^2$ 处应用 (131)，并利用引理 B.6 的最后一个断言，可得 (27)，前提是 $h_0 \le 1/\sqrt{2}$ 和 $C_* \ge 2$。所得的上界常数取决于 A_0 和固定的几何参数，但不取决于分离参数 a。

对于对角线下界 (28)，我们对 $i = j$ 和 $t = 2h^2$ 应用 (132)。如有必要，增大C_*，即可确保 $2h^2/r^2$ 超过该估计所要求的阈值。

接下来，设 $d_N(i, j) \le ah$。根据 (24) 中的度量比较，

$$d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j) \le \kappa_0 ah.$$

因此，只要 $h^2/r^2 \ge u_{\kappa_0 a}$，我们就可以对 $a' = \kappa_0 a$ 应用 (132)。由于 $\log(eK) \ge 1$，增大 C_* 后，该条件在整个 (137) 中均成立。结合 (139)，即可证明 (29)。增大 C_* 不会影响 (27) 中的上界常数。

最后，我们选择常数，使其也满足投影构造所需的几何限制。进一步增大 C_* 可确保

$$h \ge C_\delta r, \qquad ah \ge 2C_\delta r,$$

因为 $\log(eK) \ge 1$。随后，如有必要，我们减小 h_0，使得

$$h_0 \le \frac{1}{\sqrt{2}}, \qquad ah_0 \le R_0.$$

所有这些选择仅依赖于 A_0、a、α、β 和结构数据，而与 N、r、h 及实际实现的点云无关。

□

B.1.3 定理 3.1 的证明

定理 *3.1* 的证明。取引理 B.1 中的 $\alpha = \beta = 1$，并令 $\mathcal{G}_N^\varepsilon := \mathcal{E}_{N,\,\varepsilon}$。矩阵 (9) 满足 (104)。由于 $K = N\varepsilon^m \ge 1$，我们有 $\varepsilon^{-m} = N/K \le N$。因此，方程 (102) 给出 (23)。同一引理证明了 (24)–(26)。

固定 $A_0 > 0$ 和 $a \ge 1$。命题 B.7 证明，在 (30) 上，(27)–(29) 成立，且常数取值如上所述。事件 $\mathcal{E}_{N,\,\varepsilon}$ 仅涉及尺度为 ε 的固定单元中的计数。所有后续估计都是该事件的确定性推论，并且对区间内的每个 h 都成立。无需对 h 使用并集界。

□

B.1.4 定理 3.2 的证明

定理 *3.2* 的证明。从引理 B.2 中选择 α，β。将其事件与引理 B.1 中的 $\mathcal{E}_{N,\,r}$ 相交，其中 $r = (k/N)^{1/m}$ 和 η_0 针对这些固定的 α，β 进行选择。将该交集记为 $\mathcal{G}_N^k$。由于 $Nr^m = k$ 和 $r^{-m} = N/k \le N$，

$$\mathbb{P}((\mathcal{G}_N^k)^c) \le 2Ne^{-ck} + Cr^{-m}e^{-ck} \le CNe^{-c'k}.$$

在 $\mathcal{G}_N^k$ 上，(104) 成立。应用引理 B.1 和命题 B.7 即可证明所有所需结论。与前面的证明一样，这些结论对每个可容许的h同时成立。

□

B.2 定理 3.3 和推论 3.4 的证明

B.2.1 局部化列所生成的投影

现在我们转向定理 3.3 的证明。我们首先在以下抽象假设下建立所需的估计，然后证明对于这两种图构造，这些假设可由定理 3.1 和 3.2 推出。

设 V 是一个有限的 N 标签集，配备度量 d_V 和均匀概率测度 μ_V。设 L 是一个对称矩阵，并令 $T_t = e^{-tL}$。

假设 B.8。 存在正数常数 c、C、R_0、δ 以及指数 $m \geq 1$，使得

$$\mu_V(B_V(i,R)) \leq C(R+\delta)^m \quad (R>0), \tag{140}$$

$$\mu_V(B_V(i,R)) \geq cR^m \quad (\delta \leq R \leq R_0). \tag{141}$$

固定 $B > m+2$、$A_0 > B+m$ 和 $h \geq \delta$。对于 $\tau \in \{h^2, 2h^2\}$，假设

$$0 \leq (T_\tau)_{ij} \leq \frac{C_{A_0}}{Nh^m}(1+d_V(i,j)/h)^{-A_0}, \quad (T_{2h^2})_{ii} \geq \frac{c}{Nh^m}. \tag{142}$$

对于(14)中使用的固定值 $a \geq 1$，假设 $2\delta \leq ah \leq R_0$ 并且

$$d_V(i,j) \leq ah \quad \Longrightarrow \quad (T_{h^2})_{ij} \geq \frac{c_a}{Nh^m}. \tag{143}$$

(140)–(142) 中的常数与 a 无关。常数 c_a 可能依赖于 a。

引理 B.9. 在 (140)–(141)的条件下，设 $Z = \{z_1, \ldots, z_n\}$ 是极大的严格 ah-分离集，其中 $2\delta \leq ah \leq R_0$。则

$$n \asymp (ah)^{-m}, \quad \#\{\ell : d_V(i,z_\ell) \leq R\} \leq C(1+R/(ah))^m \quad (R>0). \tag{144}$$

(144) 中的比较常数与 a、h 无关。

证明。 设 $b = ah$。球 $B_V(z_\ell, b/2)$ 两两不相交，而球 $B_V(z_\ell, b)$ 覆盖 V。因此

$$nc(b/2)^m \leq 1 \leq nC(b+\delta)^m \leq nC(3b/2)^m.$$

这就证明了第一个断言。中心位于 $B_V(i,R)$ 中的球 $B_V(z_\ell, b/2)$ 两两不相交，且包含于 $B_V(i, R+b/2)$ 中。因此，

$$\#\{\ell : d_V(i,z_\ell) \leq R\}\, c(b/2)^m \leq C(R+b/2+\delta)^m \leq C(R+b)^m.$$

除以 $c(b/2)^m$ 即得第二个断言。 □

引理 B.10。 假设(144) 成立。设 $U = (u_1, \ldots, u_n) \in \mathbb{R}^{N\times n}$ 的列满足

$$|u_\ell(i)| \leq \frac{C}{\sqrt{Nh^m}}(1+d_V(i,z_\ell)/h)^{-B}. \tag{145}$$

记 $H = U^*U = I + F$，并定义

$$\|M\|_{B,ah} := \max_\ell \sum_j |M_{\ell j}|(1+d_V(z_\ell,z_j)/(ah))^B. \tag{146}$$

若 $\|F\|_{B,\,ah} \leq 1/2$，则 H 为正定矩阵，$\frac{1}{2}I \preceq H \preceq \frac{3}{2}I$，且 $\Pi = UH^{-1}U^*$ 满足

$$|\Pi_{ij}| \leq \frac{C'}{Nh^m}(1+d_V(i,j)/h)^{-B}. \tag{147}$$

此处的 C' 可能取决于 a、B、m 以及 (144) 和 (145) 中的常数，但不取决于 N、n、h。

证明。令 $w_{\ell j}=(1+d_V(z_\ell,\ z_j)/(ah))^B$。由三角不等式得 $w_{\ell j}\le w_{\ell k}w_{kj}$。因此

$$\sum_j |(MN)_{\ell j}|w_{\ell j}\le \sum_k |M_{\ell k}|w_{\ell k}\sum_j |N_{kj}|w_{kj}\le \|N\|_{B,ah}\sum_k |M_{\ell k}|w_{\ell k}.$$

对 ℓ取最大值可得

$$\|MN\|_{B,ah}\le \|M\|_{B,ah}\|N\|_{B,ah},\quad \|I\|_{B,ah}=1. \tag{148}$$

由于 F 具有对称性，我们有

$$\|F\|_{\mathrm{op}}\le \max_\ell \sum_j |F_{\ell j}|\le \|F\|_{B,ah}\le \frac{1}{2}.$$

这里，第一个不等式由 F的对称性得出，第二个则由 (146) 中的定义得出。由于 $H=I+F$，我们得出 $\frac{1}{2}I\preceq H\preceq \frac{3}{2}I$。

设 $c_j=(-1)^j4^{-j}\binom{2j}{j}$。根据 (148)，级数

$$H^{-1/2}=\sum_{j=0}^{\infty}c_jF^j$$

在 (146) 中收敛，且

$$\|H^{-1/2}\|_{B,ah}\le \sum_{j=0}^{\infty}|c_j|2^{-j}=\sqrt{2}. \tag{149}$$

该级数也在算子范数下收敛到 $H^{-1/2}$。令 $Q=UH^{-1/2}$。则 $Q^*Q=I$且 $\Pi=QQ^*$。

对于任意 i、j、ℓ，三角不等式意味着

$$(1+d_V(i,z_j)/h)^{-B}\le a^B(1+d_V(i,z_\ell)/h)^{-B}w_{j\ell}.$$

由于 $H^{-1/2}$ 和 $w_{j\ell}$ 具有对称性，（149）同样给出

$$\sum_j |(H^{-1/2})_{j\ell}|w_{j\ell}\le\sqrt{2},\quad 1\le\ell\le n.$$

由（145）和（149），

$$|Q_{i\ell}|\le \frac{C_a}{\sqrt{Nh^m}}(1+d_V(i,z_\ell)/h)^{-B}. \tag{150}$$

此外，（144）和 $B>m$ 给出

$$\sup_i\sum_\ell (1+d_V(i,z_\ell)/h)^{-B}\le C\left(1+\sum_{j\ge0}2^{-jB}(1+2^{j+1}/a)^m\right)<\infty. \tag{151}$$

对于每个 ℓ，d_V(i、z_ℓ) 和 d_V(j、z_ℓ) 中至少有一个不小于 d_V(i、j)/2。将求和按这两种可能性拆分，并应用（151），可得

$$\sum_\ell (1+d_V(i,z_\ell)/h)^{-B}(1+d_V(j,z_\ell)/h)^{-B}\le C(1+d_V(i,j)/h)^{-B}.$$

由于 $\Pi_{ij}=\sum_\ell Q_{i\ell}Q_{j\ell}$，该界以及 (150) 证明了 (147)。

□

命题 B.11。 存在 $a_0 \geq 1$，其仅取决于 (140)–(142) 中的常数，使得以下结论成立。固定 $a \geq a_0$，并假设假设 *B.8* 对此 a 的取值成立。则 (15) 满足 (34)–(36)，其中将 d_N 替换为 d_V。如果顶点的位置为 $x_i \in \mathbb{R}^d$，且满足 $|x_i - x_j| \leq d_V(i,j)$，那么(37) 也成立。

证明。 引理 B.9 给出 $n \asymp (ah)^{-m}$。对于 $1 \leq \ell \leq n$，定义

$$b_\ell := (T_{2h^2})_{z_\ell z_\ell}, \quad u_\ell := b_\ell^{-1/2} T_{h^2} e_{z_\ell}, \quad U := (u_1, \dots, u_n), \quad H := U^* U. \tag{152}$$

由 L 的对称性，

$$H_{\ell j} = \frac{(T_{2h^2})_{z_\ell z_j}}{\sqrt{b_\ell b_j}}, \quad H_{\ell\ell} = 1, \quad b_\ell \asymp (Nh^m)^{-1}. \tag{153}$$

设 $F = H - I$。对于 $\ell \neq j$，(142) 给出

$$|F_{\ell j}| \leq C(1 + d_V(z_\ell, z_j)/h)^{-A_0}.$$

Fix ℓ。至多有 $C2^{(v+1)m}$ 个中心满足 $2^v ah < d_V(z_\ell, z_j) \leq 2^{v+1} ah$。因此

$$\begin{aligned} \sum_j |F_{\ell j}|(1 + d_V(z_\ell, z_j)/(ah))^B &\leq C \sum_{v \geq 0} 2^{(v+1)m}(1 + a2^v)^{-A_0}(1 + 2^{v+1})^B \\ &\leq C a^{-A_0} \sum_{v \geq 0} 2^{v(m+B-A_0)}. \end{aligned} \tag{154}$$

该级数收敛，因为 $A_0 > B + m$。我们固定 a 足够大，使右端至多为 $1/2$。

方程 (142) 和 (153) 推出 (145)。引理 B.10 证明了 (35)。列归一化不会改变它们的张成空间，因此 $UH^{-1}U^*$ 等于 (15)。由于 a 现已固定，我们还有 $n \asymp h^{-m}$。特别地，

$$\pi_i \leq \frac{C}{Nh^m} \lesssim \frac{n}{N}.$$

对于反向界，取 z_ℓ 使得 $d_V(i, z_\ell) \leq ah$。由 (143) 和 (153)，

$$|u_\ell(i)|^2 = \frac{|(T_{h^2})_{i z_\ell}|^2}{b_\ell} \geq \frac{c_a^2/(N^2 h^{2m})}{C/(Nh^m)} \geq \frac{c'}{Nh^m}.$$

由于 $H^{-1} \succeq \frac{2}{3} I$，$U$ 的第 i 行 $u(i)$ 满足

$$\pi_i = u(i) H^{-1} u(i)^* \geq \frac{2}{3} \|u(i)\|^2 \geq \frac{2c'}{3Nh^m} \gtrsim \frac{n}{N}.$$

这证明了 (36)。

为证明 (37)，写作 $H_f = [f]_{s,\,\mathcal{X}}$。根据引理 B.14，

$$\mathrm{Var}[\mathcal{S}_{h,N}(f) \mid \mathcal{X}] \leq \frac{C H_f^2}{N^2 h^{2m}} \sum_{i,j} d_V(i,j)^{2s}(1 + d_V(i,j)/h)^{-2B}. \tag{155}$$

固定 i，先对 $d_V(i, j) \leq h$ 求和，再对 $2^v h < d_V(i, j) \leq 2^{v+1} h$ 求和。由 (140) 和 $h \geq \delta$，

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_j d_V(i,j)^{2s}(1 + d_V(i,j)/h)^{-2B} &\leq C h^{m+2s} \left(1 + \sum_{v \geq 0} 2^{v(m+2s-2B)}\right) \\ &\leq C_s h^{m+2s}. \end{aligned} \tag{156}$$

代入 (155) 得到 $\mathrm{Var}[\mathcal{S}_{h,\,N}(f) \mid \mathcal{X}] \leq C_s H_f^2 h^{2s-m}$。由于 $n \asymp h^{-m}$，除以n^2 即可证明该结论。 □

B.2.2 定理 3.3 的证明

证明。 固定 $B > m+2$ 和 $A_0 > B+m$。式 (25)–(26)、(27) 和 (28) 中的常数均与 a 无关。因此，我们可以选择足够大的 $a \geq 1$，使得 (154) 的右侧至多为 $1/2$。对于这个固定的 a，然后按照命题 B.7 选择 C_* 和 h_0。

分别在 $\mathcal{G}_N^{\varepsilon}$ 或 $\mathcal{G}_N^{k}$ 上，图是连通的。对于满足 (30) 或 (33) 的每个 h，估计式 (25)–(29) 验证了假设 B.8，其中 $V = \{1, \ldots, N\}$、$d_V = d_N$、$L = \mathcal{L}_N$ 和 $\delta = \delta_N$。此外，由 (13) 可得 $|x_i - x_j| \leq d_N(i,j)$，这正是命题 B.11 所要求的。应用该命题即可得到 (34)–(37)。 □

B.2.3 推论 3.4 的证明

证明。 对于 (38)，我们有 $N\varepsilon_N^m = K_0 \log N$。取大于 (22) 中常数的 K_0。(23) 中的失败概率为

$$CNe^{-cK_0 \log N} = CN^{1-cK_0}.$$

增大 K_0，使得 $cK_0 > q+2$，然后取充分大的 N，即可使其至多为N^{-q}。此外，

$$h_N^2 = C_* \left(\frac{K_0 \log N}{N}\right)^{2/m} \log(eK_0 \log N) \longrightarrow 0.$$

因此，对于所有充分大的 N，$\varepsilon_N \leq r_0$ 和 $h_N \leq h_0$。式 (30) 的下端点由定义可知成立。应用定理 3.3 可得

$$n \asymp h_N^{-m} = \frac{N}{K_0 \log N \, [C_* \log(eK_0 \log N)]^{m/2}} \asymp_q \frac{N}{\log N (\log\log N)^{m/2}}.$$

对于 (39)，我们有 $k_N = \lceil K_0 \log N \rceil$ 和 $r_N = (k_N/N)^{1/m} \to 0$。如有必要，增大 K_0 可确保 (31) 成立，且对于所有充分大的 N，$CNe^{-ck_N} \leq N^{-q}$。此外，

$$h_N^2 = C_* \left(\frac{k_N}{N}\right)^{2/m} \log(ek_N) \longrightarrow 0.$$

因此，$h_N \leq h_0$ 最终成立，而式 (33) 的下端点由定义可知成立。应用定理 3.3，我们得到

$$n \asymp h_N^{-m} = \frac{N}{k_N [C_* \log(ek_N)]^{m/2}} \asymp_q \frac{N}{\log N (\log\log N)^{m/2}}.$$

最后地，定理 3.3 的结论对 t 上的每个 $h_N \leq h \leq h_0$ 同时成立相同的事件，从而证明最后一个断言。 □

B.3 定理 3.5 和命题 3.6 的证明

我们首先记录对 f 的一般近似的估计。

引理 B.12。 给定 X，令 Π 为一个秩为 n 的正交投影，满足 $\Pi_{ii} = \pi_i \geq cn/N$，并令 S 为相应的投影行列式点过程。假设 Af 由 X 以及在独立于 S 选取的顶点处对 f 的取值确定，并且可根据这些取值计算出 $I_N(Af)$。那么

$$\widehat{I}(f) := I_N(Af) + \frac{1}{N} \sum_{i \in \mathcal{S}} \frac{f(x_i) - Af(x_i)}{\pi_i} \tag{157}$$

对于 $I_N(f)$ 是条件无偏的，并且满足

$$\mathrm{Var}[\widehat{I}(f) \mid \mathcal{X}] \leq \frac{1}{N^2} \sum_i \frac{|f(x_i) - Af(x_i)|^2}{\pi_i} \leq \frac{1}{cn} \|f - Af\|^2_{L^2(\mu_N)}. \tag{158}$$

证明。令 $v_i = f(x_i) - Af(x_i)$ 和 $u_i = v_i/(N\pi_i)$。在给定点云以及用于定义 Af 的值的条件下，所有这些量都是固定的。公式（168）给出

$$\mathbb{E}[\widehat{I}(f) \mid \mathcal{X}] = I_N(Af) + \sum_i \pi_i u_i = I_N(Af) + I_N(f - Af) = I_N(f).$$

方程 (169) 给出

$$\mathrm{Var}[\widehat{I}(f) \mid \mathcal{X}] \le \sum_i \pi_i u_i^2 = \frac{1}{N^2} \sum_i \frac{v_i^2}{\pi_i} \le \frac{1}{cnN} \sum_i v_i^2.$$

这就是 (158)。 □

定理 *3.5* 的证明。以点云属于定理 3.3 的事件为条件。在抽取 $\mathcal{S}_{h,N}$ 之前，(41) 中的中心和划分已固定。对于 $i \in C_\ell$，方程 (14) 和 (13) 给出

$$|f(x_i) - A_h f(x_i)| = |f(x_i) - f(x_{z_\ell})| \le [f]_{s,\mathcal{X}} |x_i - x_{z_\ell}|^s \le [f]_{s,\mathcal{X}} (ah)^s.$$

因此，

$$\|f - A_h f\|^2_{L^2(\mu_N)} \le a^{2s} h^{2s} [f]^2_{s,\mathcal{X}}. \tag{159}$$

$I_N(A_h f)$ 的值由 (41) 给出，而 (36) 验证了引理 B.12 的假设。应用 (158)，再应用 (34)，即可证明

$$\mathrm{Var}[\widehat{I}_{h,N}(f) \mid \mathcal{X}] \le C_s [f]^2_{s,\mathcal{X}} n^{-1} h^{2s} \le C'_s [f]^2_{s,\mathcal{X}} n^{-1-2s/m}.$$

由于该估计量是条件无偏的，这就证明了 (44)。共有 n 个中心，且恰有 n 个采样顶点，因此最多需要 $2n$ 次函数求值。最后，推论 3.4 给出了所述概率。

□

命题 *3.6* 的证明。记

$$\widehat{I}_N - \int_{\mathcal{M}} f \, \mathrm{d}\nu = \widehat{I}_N - I_N(f) + I_N(f) - \int_{\mathcal{M}} f \, \mathrm{d}\nu.$$

给定$\mathcal{X}$时，第一项的条件均值为零，而第二项由$\mathcal{X}$确定。因此，它们乘积的期望为零。平方后取期望可得

$$\mathbb{E}\left| \widehat{I}_N - \int_{\mathcal{M}} f \, \mathrm{d}\nu \right|^2 = \mathbb{E}[\,\mathrm{Var}(\widehat{I}_N \mid \mathcal{X})] + \mathrm{Var}(I_N(f)).$$

x_i的独立性给出 $\mathrm{Var}(I_N(f)) = \mathrm{Var}_\nu(f)/N$，从而证明了（45）。 □

B.4 定理 3.7 的证明

我们证明定理 3.7 中两个统计量的匹配方差下界和条件中心极限定理。除非另有说明，我们均考虑属于定理 3.3 的事件中的点云。所有期望和方差均相对于 DPP 计算，并将点云视为固定。对于该事件中的所有点云，这些常数均一致。

引理 B.13。固定定理 *3.3* 中的 A_0 和 B。存在常数 $a_0 \ge 1$ 和 $c > 0$，它们仅依赖于 A_0、B和结构数据，使得对每个$a \ge a_0$，以下结论均成立。在定理 *3.3* 的相应高概率事件上，对于其中指定值域内的每个 h，

$$(\Pi_h)_{ij} \ge \frac{c}{Nh^m}, \qquad i, j \in B_N(z_\ell, h), \tag{160}$$

对于每个中心 $z_\ell \in Z$。

证明。我们考虑由归一化列 U 构成的矩阵及其格拉姆矩阵 H，它们在（152）中引入。回顾加权矩阵范数

$$\|M\|_{B,ah} := \max_{1\le \ell\le n} \sum_{j=1}^{n} |M_{\ell j}| \left(1+\frac{d_N(z_\ell, z_j)}{ah}\right)^{B}.$$

将 $H = I + F$ 代入 (154)，可得

$$\|F\|_{B,ah} \le C_F a^{-A_0} =: \theta(a), \tag{161}$$

其中 C_F 与 a 无关。

由 (152)，我们有 $u_\ell(i) = b_\ell^{-1/2} (T_{h^2} \delta_{z_\ell})(i)$。结合 (27) 中热核的上界以及 (153) 中的估计 $b_\ell \asymp (Nh^m)^{-1}$，可得

$$0 \le u_\ell(i) \le \frac{C}{\sqrt{Nh^m}} \left(1+\frac{d_N(i, z_\ell)}{h}\right)^{-A_0}.$$

接下来利用打包估计 (144)，可知对于任意 $\beta > m$，有

$$\sum_{\ell=1}^{n} \left(1+\frac{d_N(i, z_\ell)}{h}\right)^{-\beta} = \beta \int_0^\infty (1+t)^{-\beta-1} \#\{\ell : d_N(i, z_\ell) \le th\} \, \mathrm{d}t \tag{162}$$

$$\le C\beta \int_0^\infty \left(1+\frac{t}{a}\right)^{m} (1+t)^{-\beta-1} \, \mathrm{d}t \le C_\beta, \tag{163}$$

其中 C_β 与 a 无关。因此，若 $u(i)$ 表示 U 的第 i 行，则

$$\|u(i)\|^2 \le \frac{C_U}{Nh^m}, \tag{164}$$

其中 C_U 与 a 无关。

对于每个固定的 a，我们在定理 3.3 中选取 C_* 和 h_0，使得 (29) 对$d_N(i,j) \le h$ 以及对 $d_N(i,j) \le ah$均成立，且前一估计中的常数与 a无关。

接下来，我们在 $d_N(i, z_\ell) \le h$ 时为 $u_\ell(i)$ 建立一个下界，其常数与 a无关。由 (29)，对 $d_N(i, z_\ell) \le h$，我们有 $(T_{h^2})_{iz_\ell} \ge c_1/(Nh^m)$，其中 $c_1 > 0$与 a无关。由于由 (153) 可得 $u_\ell(i) = b_\ell^{-1/2} (T_{h^2})_{iz_\ell}$ 以及 $b_\ell \le C/(Nh^m)$，故对$i, j \in B_N(z_\ell, h)$，

$$(UU^*)_{ij} \ge u_\ell(i) u_\ell(j) \ge \frac{c_0}{Nh^m}, \tag{165}$$

其中 $c_0 > 0$ 与 a无关。

选取充分大的 $a \ge 4$，使得

$$\theta(a) \le \min\{1/2, c_0/(4C_U)\},$$

其中 $\theta(a)$ 由 (161) 定义。由于 F 是对称的，(146) $\|F\|_{\mathrm{op}} \le \max_\ell \sum_j |F_{\ell j}| \le \|F\|_{B,ah} \le \theta(a)$。(164) 中加权范数的定义给出 $\lambda_{\min}(H) \ge 1-\theta(a)$。因此，利用 (161) 和 $\theta(a) \le 1/2$ 这一事实，我们得到 $\|H^{-1} - I\|_{\mathrm{op}} \le \|H^{-1}\|_{\mathrm{op}} \|F\|_{\mathrm{op}} \le 2\theta(a)$，并且 (164) 给出

$$|(\Pi_h - UU^*)_{ij}| = |u(i)(H^{-1} - I)u(j)^*| \le \frac{2C_U\theta(a)}{Nh^m} \le \frac{c_0}{2Nh^m}.$$

将其与（165）结合即可证明（160）。 □

现在我们转而讨论方差界。要应用（160），我们需要在 Z中的中心 h距离范围内有足够多的顶点。由（107）和（100），存在正数常数c，C，R_*使得

$$\mu_N(B_{\mathcal{M}}(x,R)) \geq cR^m, \quad x \in \mathcal{M}, \ Cr \leq R \leq R_*. \tag{166}$$

事实上，对于 $R \geq 2\eta_0 r$，(107) 中的下界至少为 $c\mu(B_{\mathcal{M}}(x, R/2))$.

此外，推论 3.4 中的图参数满足 $K \asymp \log N$。每个可容许的 le sequ因此，定理 3.7 中的条件均满足

$$h \longrightarrow 0, \quad \frac{r}{h} \leq \frac{1}{\sqrt{C_* \log(eK)}} \longrightarrow 0, \quad \frac{\delta_N}{h} \longrightarrow 0. \tag{167}$$

特别地，对于任意固定的 $\rho > 0$ 以及所有充分大的N，(166) 适用于半径为 ρh 的球。

我们回顾投影行列式点过程的以下经典恒等式。证明参见例如 [5] 的第 4 章。

引理 B.14. 设 $\Pi \in \mathbb{R}^{N\times N}$ 是秩为 n 的正交投影，且 S 的分布为(18)，其中 Π_h 替换为 Π。那么，对于每个 $u \in \mathbb{R}^N$，

$$\mathbb{E}\sum_{i\in\mathcal{S}} u_i = \sum_i \Pi_{ii} u_i, \tag{168}$$

$$\mathrm{Var}\left[\sum_{i\in\mathcal{S}} u_i\right] = \sum_i \Pi_{ii} u_i^2 - \sum_{i,j} \Pi_{ij}^2 u_i u_j \leq \sum_i \Pi_{ii} u_i^2, \tag{169}$$

$$\mathrm{Var}\left[\sum_{i\in\mathcal{S}} u_i\right] = \frac{1}{2}\sum_{i,j} (u_i - u_j)^2 \Pi_{ij}^2. \tag{170}$$

引理 B.15. 固定 $a \geq a_0$，其中 a_0 如引理 *B.13* 中所述，并令 $h = h(N)$ 满足 (167)。对于任意固定的非恒定 $f \in C^1(\mathcal{M})$，存在常数 $c_f, C_f > 0$，使得对所有充分大的 N，在(46) 中定义的方差满足

$$c_f n h^2 \leq V_{h,N}(f) \leq C_f n h^2, \qquad c_f \frac{h^2}{n} \leq W_{h,N}(f) \leq C_f \frac{h^2}{n}. \tag{171}$$

对于处于定理 *3.3* 所述事件中的点云，常数和 N 的阈值均为一致的。

证明。由于 $\mathcal{M}$ 是连通的，且 f 非恒定，因此存在 $x_0 \in \mathcal{M}$、$R > 0$ 和 $g > 0$，使得 $R \leq R_*$，并且

$$|\nabla f(x)| \geq g \quad \forall x \in \overline{B_{\mathcal{M}}(x_0, R)}.$$

令 $U_0 = B_{\mathcal{M}}(x_0, R/4)$、$U_1 = B_{\mathcal{M}}(x_0, R/2)$，并设 $J_N = \{\ell : x_{z_\ell} \in U_1\}$。根据 (24)，存在固定常数 $\kappa_-, \kappa_+ \geq 1$，使得

$$d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j) \leq \kappa_- d_N(i,j), \qquad d_N(i,j) \leq \kappa_+ d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j). \tag{172}$$

当 N 足够大时，U_0 中的每个顶点到 U_1 中某个中心的图距离都不超过 ah，因为 $\kappa_- ah < R/4$。因此，由方程 (166) 和 (25) 得

$$c(R/4)^m \leq \mu_N(U_0) \leq \sum_{\ell\in J_N} \mu_N(B_N(z_\ell, ah)) \leq C|J_N|(a+1)^m h^m.$$

由此可得

$$|J_N| \geq c_f h^{-m}. \tag{173}$$

令 $t_0 = (4\kappa_+)^{-1}$。对于 $\ell \in J_N$，定义

$$v_\ell := \frac{\nabla f(x_{z_\ell})}{|\nabla f(x_{z_\ell})|}, \quad y_\ell^\pm := \exp_{x_{z_\ell}}(\pm t_0 h v_\ell).$$

考虑测地线

$$s \longmapsto \exp_{x_{z_\ell}}(\pm s v_\ell), \quad 0 \le s \le t_0 h,$$

它们连接 x_{z_ℓ} 与 $y_\ell^\pm$。由于

$$\frac{d}{ds} f(\exp_{x_{z_\ell}}(\pm s v_\ell))\Big|_{s=0} = \pm |\nabla f(x_{z_\ell})|,$$

f 的一阶展开给出

$$f(y_\ell^\pm) - f(x_{z_\ell}) = \pm t_0 h |\nabla f(x_{z_\ell})| + o(h),$$

其中，由于 $\ell \in J_N$ 的连续性以及$\mathcal{M}$的单位切丛的紧致性，余项关于 $\ell \in J_N$ 一致。

由于 $|\nabla f(x_{z_\ell})| \ge g$ 对于 $\ell \in J_N$，我们得出，对于所有充分大的 N，$\pm(f(y_\ell^\pm) - f(x_{z_\ell})) \ge g t_0/2h$，且关于 $\ell \in J_N$ 一致。

取

$$\rho_0 = \min\left\{ \frac{t_0}{4}, \frac{g t_0}{8\|\nabla f\|_\infty} \right\}, \qquad b_f = \frac{g t_0}{4},$$

并令 $V_\ell^\pm$为标签集合 i，使得 $x_i \in B_{\mathcal{M}}(y_\ell^\pm, \rho_0 h)$。

对于每个 $i \in V_\ell^\pm$，我们有 $|f(x_i) - f(y_\ell^\pm)| \le \|\nabla f\|_\infty d_{\mathcal{M}}(x_i, y_\ell^\pm) \le \|\nabla f\|_\infty \rho_0 h$. 将此结果与前面对 $f(y_\ell^\pm) - f(x_{z_\ell})$ 的估计结合起来，我们得到

$$\pm(f(x_i) - f(x_{z_\ell})) \ge \frac{g t_0}{2} h - \|\nabla f\|_\infty \rho_0 h \ge \frac{3 g t_0}{8} h \ge b_f h.$$

此外，由于 $r/h \to 0$ 且 $\rho_0 > 0$ 固定，对于所有充分大的 N，(166) 均可取 $R = \rho_0 h$。因此我们已证明

$$|V_\ell^\pm| \ge p_f N h^m, \text{ and } \pm\left(f(x_i) - f(x_{z_\ell})\right) \ge b_f h \quad \text{for } i \in V_\ell^\pm, \tag{174}$$

其中 $\rho_f > 0$。最后，对于 $i \in V_\ell^\pm$，度量比较 (172) 给出

$$d_N(i, z_\ell) \le \kappa_+ d_{\mathcal{M}}(x_i, x_{z_\ell}) \le \kappa_+(t_0 + \rho_0) h \le \frac{5h}{16} < \frac{h}{2}.$$

由于对于 $j \ne \ell$，$d_N(z_\ell, z_j) > ah \ge h$，因此我们有 $d_N(i, z_j) > h - 5h/16 > d_N(i, z_\ell)$。因此，$V_\ell^\pm$ 中的每个顶点都属于 C_ℓ。因此，不同中心对应的集合彼此不相交，而根据 (174)，$V_\ell^+ \cap V_\ell^- = \varnothing$。

对于每个 $\ell \in J_N$，由（174）可得 $f(x_i) - f(x_j) \ge 2 b_f h$，对于 $i \in V_\ell^+$，$j \in V_\ell^-$.此外，由于 $V_\ell^\pm \subseteq B_N(z_\ell, h)$，根据（160）可得 $(\Pi_h)_{ij} \ge c/(N h^m)$。

由于 $V_\ell^\pm \subseteq C_\ell$ 和集合 C_ℓ 两两不相交，因此，对于不同的 ℓ，上面考虑的有序对 (i, j) 各不相同。应用 (170)，并利用 Π_h的对称性，可得

$$\begin{aligned} V_{h,N}(f) &\ge \sum_{\ell \in J_N} \sum_{i \in V_\ell^+} \sum_{j \in V_\ell^-} (f(x_i) - f(x_j))^2 (\Pi_h)_{ij}^2 \\ &\ge \sum_{\ell \in J_N} |V_\ell^+|\,|V_\ell^-| (2 b_f h)^2 \frac{c^2}{N^2 h^{2m}} \\ &\ge c_f |J_N| h^2 \ge c_f h^{2-m} \asymp_f n h^2. \end{aligned}$$

这里，最后两个不等式由 (174) 和此前得到的界 $|J_N| \gtrsim h^{-m}$推出。

对于第二个统计量，令

$$u_i = \frac{f(x_i) - A_h f(x_i)}{N\pi_i}. \tag{175}$$

在 $V_\ell^{\pm}$ 上，我们有 $A_h f(x_i) = f(x_{z_\ell})$。此外，根据 (36) 和 (34)，$\pi_i \le C/(Nh^m)$。因此

$$u_i \ge c_f h^{m+1}, \text{ for } i \in V_\ell^+, \quad u_j \le -c_f h^{m+1} \text{ for } j \in V_\ell^-.$$

在给定 $\mathcal{X}$ 的条件下，项 $I_N(A_h f)$ 是固定的。将 (170) 应用于 (175)，得到

$$\begin{aligned} W_{h,N}(f) &\ge \sum_{\ell \in J_N} |V_\ell^+|\,|V_\ell^-| c_f h^{2m+2} \frac{c^2}{N^2 h^{2m}} \\ &\ge c_f |J_N| h^{2m+2} \ge c_f h^{m+2} \asymp_f \frac{h^2}{n}. \end{aligned}$$

最后，$[f]_{1,\ \mathcal{M}} < \infty$。对于欧几里得距离足够小的点对，这由 (101) 和测地线利普希茨界得出；对于其余点对，则由 f 的有界性得出。现在，(171) 中的上界由 (37)、(44) 和 (34) 得出。

□

引理 B.16. 考虑一列点云和尺度 $h = h(N)$，使得 (25) 和打包估计 (144) 在 $d_V = d_N$ 下成立，其中 $a \ge 1$ 为固定值，且常数与 N 无关。另假设 $\delta_N \le h$。

令 $Q \in \mathbb{R}^{N\times n}$ 满足 $Q^*Q = I$，并且

$$|Q_{i\ell}| \le \frac{C}{\sqrt{Nh^m}} \left(1 + \frac{d_N(i, z_\ell)}{h}\right)^{-B}, \quad B > m + 2, \tag{176}$$

其中 B 和 C 与 N相互独立，并假设 $n \to \infty$。令 $\mathcal{S}_N$ 为与 QQ^*相关联的投影行列式点过程，并假设实值 f_i 满足

$$|f_i - f_j| \le L d_N(i, j), \tag{177}$$

其中 L 与 N相互独立。

定义 $Y_N = \sum_{i\in\mathcal{S}_N} f_i$ 和 $v_N = \mathrm{Var}(Y_N)$。若对于某个与 N独立的 $c > 0$，有 $v_N \ge cnh^2$，则

$$\frac{Y_N - \mathbb{E}Y_N}{\sqrt{v_N}} \Longrightarrow \mathcal{N}(0, 1). \tag{178}$$

*P*证明。令 $D_f = \mathsf{diag}(f_1, \ldots, f_N)$、$\gamma_\ell = f_{z_\ell}$和 $\Gamma = \mathsf{diag}(\gamma_1, \ldots, \gamma_n)$。对于实值 t，定义 e

$$\mathcal{A}(t) = e^{-it\Gamma/2} Q^* e^{itD_f} Q e^{-it\Gamma/2}. \tag{179}$$

回顾一下，柯西–比内公式给出

$$\det(Q^* e^{itD_f} Q) = \sum_{\substack{J\subseteq\{1,\ldots,N\} \\ |J|=n}} e^{it\sum_{i\in J} f_i} \det(Q_{J,:})^2,$$

其中，$Q_{J,:}$ 表示由索引为 J 的行构成的 Q 的子矩阵。由于

$$\mathbb{P}(\mathcal{S}_N = J) = \det((QQ^*)_{J,J}) = \det(Q_{J,:})^2$$

根据式（18），我们得到

$$\mathbb{E}e^{itY_N} = \det(Q^* e^{itD_f} Q), \qquad \det \mathcal{A}(t) = e^{-it\,\mathrm{Tr}\,\Gamma}\mathbb{E}e^{itY_N}. \tag{180}$$

根据$\mathcal{A}(t)$和 $Q^*Q = I$的定义，我们有$\mathcal{A}(0) = I$。此外，

$$\mathcal{A}(t)_{\ell k} = \sum_i Q_{i\ell}Q_{ik}e^{it\Delta_{i\ell k}}, \quad \Delta_{i\ell k} = f_i - \frac{\gamma_\ell + \gamma_k}{2}.$$

现在，固定满足 $2+\eta < B-m$的 $0 < \eta \le 1$。对于 $p \in \{1, 2, 2+\eta\}$，令

$$W_p(\ell, k) = \sum_i |Q_{i\ell}Q_{ik}|\,|\Delta_{i\ell k}|^p, \qquad r_{i\ell} = d_N(i, z_\ell)/h.$$

由（177），$|\Delta_{i\ell k}| \le Lh(r_{i\ell} + r_{ik})/2$。因此，（176）给出

$$\sum_k W_p(\ell, k) \le \frac{C_p h^p}{Nh^m} \sum_i \Big[(1+r_{i\ell})^{-(B-p)} \sum_k (1+r_{ik})^{-B} + (1+r_{i\ell})^{-B} \sum_k (1+r_{ik})^{-(B-p)} \Big]. \tag{181}$$

由于 $B - p > m$，将（163）应用于 $\beta = B$ 和 $\beta = B-p$ 可得

$$\sup_i \sum_k (1+r_{ik})^{-B} \le C, \quad \sup_i \sum_k (1+r_{ik})^{-(B-p)} \le C.$$

此外，对于每个 $\beta > m$，（25）和 $\delta_N \le h$ 给出

$$\begin{aligned}\sum_i (1+r_{i\ell})^{-\beta} &= \beta \int_0^\infty \#B_N(z_\ell, ht)(1+t)^{-\beta-1}\,\mathrm{d}t \\ &\le CNh^m\beta \int_0^\infty (1+t)^{m-\beta-1}\,\mathrm{d}t \le C_\beta N h^m.\end{aligned}$$

将这些估计代入（181），得到

$$\max_\ell \sum_k W_p(\ell, k) \le C_p h^p. \tag{182}$$

由于 W_p 是对称的，我们也有

$$\|W_p\|_{\mathrm{op}} \le \max_\ell \sum_k W_p(\ell, k) \le C_p h^p.$$

定义实对称矩阵 M_1, M_2 如下

$$(M_j)_{\ell k} = \sum_i Q_{i\ell}Q_{ik}\Delta_{i\ell k}^j, \qquad j = 1, 2.$$

现在，根据定义 $W_p(\ell, k)$，对每个 ℓ, k，我们有

$$|(M_j)_{\ell k}| \le W_j(\ell, k), \quad j = 1, 2.$$

M此外，由于 $\mathcal{A}(0) = I$，不等式 $|e^{iu} - 1| \le |u|$ 和 $|e^{iu} - 1 - iu| \le u^2/2$ 给出 e

$$|(\mathcal{A}(t) - I)_{\ell k}| \le |t| W_1(\ell, k),$$
$$|(\mathcal{A}(t) - I - itM_1)_{\ell k}| \le \frac{t^2}{2} W_2(\ell, k).$$

同样地，对实数 u使用 $|e^{iu}-1-iu+u^2/2|\le C_\eta|u|^{2+\eta}$，我们得到

$$\left|\left(\mathcal{A}(t)-I-itM_1+\frac{t^2}{2}M_2\right)_{\ell k}\right|\le C_\eta|t|^{2+\eta}W_{2+\eta}(\ell,k).$$

根据 (182)，这些估计中每一项的绝对行和与列和均由相应的常数 C_ph^p所界。因此，

$$\begin{aligned}\|M_j\|_{\mathrm{op}}&\le Ch^j\quad(j=1,2),\\ \|\mathcal{A}(t)-I\|_{\mathrm{op}}&\le C|t|h,\\ \|\mathcal{A}(t)-I-itM_1\|_{\mathrm{op}}&\le Ct^2h^2,\end{aligned}\tag{183}$$

$$\mathcal{A}(t)=I+itM_1-\frac{t^2}{2}M_2+R(t),$$

$$\|R(t)\|_{\mathrm{op}}\le C|th|^{2+\eta}.\tag{184}$$

记 $F=Q^*D_fQ$ 和 $G=Q^*D_f^2Q$。将 $\Delta_{i\ell k}$ 的定义代入 M_1 和 M_2的表达式，并利用 $Q^*Q=I$，得到

$$M_1=F-\Gamma,\qquad M_2=G-\Gamma F-F\Gamma+\Gamma^2.$$

因此，DPP 的均值和方差恒等式意味着

$$\operatorname{Tr}M_1=\mathbb{E}Y_N-\operatorname{Tr}\Gamma,\qquad \operatorname{Tr}(M_2-M_1^2)=\operatorname{Tr}(G-F^2)=v_N.\tag{185}$$

当 $|t|h$ 充分小时，令 $E(t)=\mathcal{A}(t)-I$，并在 I处将矩阵对数展开为收敛级数：

$$\operatorname{Tr}\log\mathcal{A}(t)=\operatorname{Tr}E(t)-\frac{1}{2}\operatorname{Tr}(E(t)^2)+O(n\|E(t)\|_{\mathrm{op}}^3).$$

根据 (183)，$E(t)^2=-t^2M_1^2+O_{\mathrm{op}}(|th|^3)$。利用 (184) 和 $|\operatorname{Tr}M|\le n\|M\|_{\mathrm{op}}$，因此得到

$$\operatorname{Tr}\log\mathcal{A}(t)=it\operatorname{Tr}M_1-\frac{t^2}{2}\operatorname{Tr}(M_2-M_1^2)+O(n|th|^{2+\eta}).\tag{186}$$

这里，三次误差由 $|th|^{2+\eta}$吸收，因为 $\eta\le1$。

固定 $u\in\mathbb{R}$ 并设 $t=u/\sqrt{v_N}$。方差下界给出

$$|t|h\le\frac{|u|}{\sqrt{cn}},\qquad n|th|^{2+\eta}\le C|u|^{2+\eta}n^{-\eta/2}\longrightarrow0.$$

由于 $\det\mathcal{A}(t)=\exp(\operatorname{Tr}\log\mathcal{A}(t))$，方程 (180)、(185) 和 (186) 给出

$$\mathbb{E}\exp\left(iu\frac{Y_N-\mathbb{E}Y_N}{\sqrt{v_N}}\right)=\exp\{-u^2/2+o(1)\}.$$

特征函数的连续性定理证明了 (178)。 □

引理 B.17. 设 S_N 服从秩为 n 的投影 *DPP* 分布，其中 $n\to\infty$。假设实值 $g_N(i)$ 满足 $\sup_i|g_N(i)|\le C$ 且

$$v_N:=\operatorname{Var}\left(\sum_{i\in\mathcal{S}_N}g_N(i)\right)\ge cn,$$

其中 $c,C>0$ 与 N无关。于是

$$\frac{\sum_{i\in\mathcal{S}_N}g_N(i)-\mathbb{E}\left[\sum_{i\in\mathcal{S}_N}g_N(i)\right]}{\sqrt{v_N}}\Longrightarrow\mathcal{N}(0,1).$$

证明。 设 $Q \in \mathbb{R}^{N\times n}$ 具有正交归一列，使得 QQ^* 是与 $\mathcal{S}_N$相关联的投影，并令 $D = \mathrm{diag}(g_N(1)\ldots, g_N(N))$. 由于 $Q^*Q = I$且 $\|D\|_{\mathrm{op}} \le C$，由泰勒公式可得

$$Q^* e^{itD} Q = I + itQ^*DQ - \frac{t^2}{2}Q^*D^2Q + R(t), \qquad \|R(t)\|_{\mathrm{op}} \le C|t|^3.$$

此外，由 (168) 和 (169),

$$\mathrm{Tr}(Q^*DQ) = \mathbb{E}\sum_{i\in\mathcal{S}_N} g_N(i), \qquad \mathrm{Tr}(Q^*D^2Q - (Q^*DQ)^2) = v_N.$$

按照 (186) 展开矩阵对数，得到

$$\mathrm{Tr}\log(Q^*e^{itD}Q) = it\mathbb{E}\sum_{i\in\mathcal{S}_N} g_N(i) - \frac{t^2 v_N}{2} + O(n|t|^3).$$

对于固定的 $u \in \mathbb{R}$，设 $t = u/\sqrt{v_N}$。由于 $v_N \ge cn$，我们有

$$n|t|^3 \le C_u n^{-1/2} \longrightarrow 0.$$

因此，(180) 中取 $D_f = D$ 和 $\Gamma = 0$，可得

$$\mathbb{E}\exp\left(iu\frac{\sum_{i\in\mathcal{S}_N} g_N(i) - \mathbb{E}\sum_{i\in\mathcal{S}_N} g_N(i)}{\sqrt{v_N}}\right) \longrightarrow e^{-u^2/2}.$$

结论由列维连续性定理得出。 □

定理 *3.7* 的证明。 固定引理 B.13 中的 a 。根据推论 3.4，对于 $q > 1$，$\mathcal{G}_N^\varepsilon$ 和 $\mathcal{G}_N^k$ 的失效概率关于 N 可求和。因此，博雷尔-坎泰利引理表明，对于无限序列 $(x_i)_{i\ge1}$ 的几乎每个实现，这两个事件对所有充分大的 N 均成立。固定这样一个实现。

由于 (167) 成立，引理 B.15 给出了 (47)。此外， $h \to 0$ 和 (34) 蕴含 $n \to \infty$。(47) 中的下界还表明，对于所有充分大的 N，$V_{h,N}(f)$ 和 $W_{h,N}(f)$ 均为正。

引理 B.10 中构造的矩阵 $Q = UH^{-1/2}$ 满足 $Q^*Q = I$、 $QQ^* = \Pi_h$ 以及 (176)，这是由 (150) 得到的。此外，由 (172) 可得

$$|f(x_i) - f(x_j)| \le \|\nabla f\|_\infty d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j) \le \kappa_- \|\nabla f\|_\infty d_N(i,j).$$

因此，引理 B.16 和 (171) 中的第一个下界给出了 (48)。

对于 (49)，定义

$$g_N(i) = \frac{n}{h}\frac{f(x_i) - A_h f(x_i)}{N\pi_i}.$$

由 (36) 和 (14) 可得,

$$\sup_i |g_N(i)| \le C\kappa_- a\|\nabla f\|_\infty.$$

此外，由（171）可得

$$\mathrm{Var}\left[\sum_{i\in\mathcal{S}_{h,N}} g_N(i)\,\middle|\,\mathcal{X}\right] = \frac{n^2}{h^2}W_{h,N}(f) \ge c_f n.$$

引理 B.17 适用。由于

$$\sum_{i\in\mathcal{S}_{h,N}} g_N(i) - \mathbb{E}\left[\sum_{i\in\mathcal{S}_{h,N}} g_N(i)\,\middle|\,\mathcal{X}\right] = \frac{n}{h}(\widehat{I}_{h,N}(f) - I_N(f)),$$

引理 B.17 给出了（49）。这证明了对于上述固定的每个云序列，两个条件中心极限定理均成立。由于 Φ 是连续的，条件分布函数对每个 $t\in\mathbb{R}$ 都收敛，如所述。

□

C 第4节的证明

C.1 命题 4.1 的证明

证明。固定 $\mathcal{X}$，令 $J\subseteq\{1,\dots,N\}$ 的基数为 n。如果 J包含C_ℓ的两个顶点，则（P_{sc}）$_{J,J}$ 的对应行根据（51）相等。因此，其行列式为零。否则，由于 $|J|=n$ 且有 n 个单元，J 恰好包含来自每个C_ℓ的一个顶点 u_ℓ。按 $u_1,\dots,u_n$ 的顺序，矩阵（P_{sc}）$_{J,J}$为对角矩阵，对角线元素为 $M_1^{-1},\dots,M_n^{-1}$。其行列式就是（52）中的乘积，即 n 独立均匀选择 $u_\ell\in C_\ell$ 的联合概率。特别地，$i\in C_\ell$ 的包含概率为 M_ℓ^{-1}。

对于命题中的等分，令 $D_\pm$ 为对角矩阵，其在 $i\in C_\ell^+$处的元素为 1，在 $i\in C_\ell^-$处的元素为 -1。于是 $\psi_\ell = D_\pm\phi_\ell$ 和 $P_{\mathrm{H}} = D_\pm P_{\mathrm{sc}} D_\pm$。对于每个 J，

$$\det((P_{\mathrm{H}})_{J,J}) = \det((D_\pm)_{J,J})^2\det((P_{\mathrm{sc}})_{J,J}) = \det((P_{\mathrm{sc}})_{J,J}).$$

因此，这两个投影给出相同的分布。 □

C.2 定理 4.2 的证明

证明。令 $d_N^{(0)}$ 为与 A^{t_N}相关联的最短路径距离，并以 $B_N^{(0)}(i,\ R)$ 表示相应的闭球。令 Γ_N 为定理 3.1 中的事件 $\mathcal{G}_N^\varepsilon$，其中 $\varepsilon = t_N$。由于 $Nt_N^m = K_0\log N$，由 (23) 得到

$$\mathbb{P}(\Gamma_N^c) \le CN\exp(-cK_0\log N) \le N^{-q},$$

只要 K_0 足够大且 $N\ge N_0$即可。必要时，我们还增大 N_0，使得 t_N满足 (22)。

令 $\delta = C_\delta t_N$。根据 (24)–(26)，在 Γ_N 上，图 A^{t_N} 是连通的，并且

$$d_N^{(0)}(i,j) \le C_g d_{\mathcal{M}}(x_i,x_j), \tag{187}$$

$$\mu_N(B_N^{(0)}(i,R)) \le C_v(R+\delta)^m \qquad (R>0), \tag{188}$$

$$\mu_N(B_N^{(0)}(i,R)) \ge c_v R^m \qquad (\delta\le R\le R_0). \tag{189}$$

这里的 C_g、C_v、c_v是结构常数。

比较 d_N 和 $d_N^{(0)}$。固定$\mathcal{X}\in\Gamma_N$。我们首先证明，(55) 中的每个图都包含 A^{t_N}，且其所有边长都不超过 ℓ_0。

对于 ε-图，这些性质可直接由 $t_N\le\varepsilon\le\ell_0$ 得出。对于 A^k，我们将分别进行验证。

如果 $|x_i - x_j| \le t_N$，那么 $d_N^{(0)}(i,\ j) \le t_N$。因此，由 (188) 可得

$$\begin{aligned}\#\{j : |x_i - x_j| \le t_N\} &\le N\mu_N(B_N^{(0)}(i, t_N)) \\ &\le C_v N(t_N + \delta)^m \\ &= C_v(1 + C_\delta)^m K_0 \log N.\end{aligned}$$

选择 $K_1 > C_v(1 + C_\delta)^m K_0$。对于 $k \ge K_1 \log N$，每个满足 $|x_i - x_j| \le t_N$ 的 $j \ne i$ 都属于$\mathcal{N}_k(i)$，包括多个顶点与 x_i 的距离相同的情况。因此

$$A_{ij}^{t_N} \le A_{ij}^k, \qquad 1 \le i, j \le N.$$

接下来证明，对每个 i 都有 $R_i \le \ell_0$。令 $b = \min\{\ell_0, R_0\}/2$，并增大 N_0，使得$\delta \le b$。根据 (189),

$$\#\{j \ne i : d_N^{(0)}(i, j) \le b\} \ge c_v N b^m - 1.$$

由 (13)，由于 $|x_i - x_j| \le d_N^{(0)}(i, j)$，上面计数的每个顶点到 x_i 的欧几里得距离都不超过 b。

选择 $0 < c_* < \min\{1, c_v b^m/2\}$。对于所有充分大的 N 以及每个 $k \le c_* N$，都有

$$c_v N b^m - 1 \ge k.$$

因此，对于每个 i 都有 $R_i \le b$，并且 A^k 的每条边长度至多为 $b \le \ell_0$。

现在令 A 为 (55) 中任一邻接矩阵，其最短路径距离为 d_N。我们已证明，对于每个 i 都有 $A_{ij}^{t_N} \le A_{ij}, j$。由于两个图中每条边的长度均为 $|x_i - x_j|$，因此

$$d_N(i, j) \le d_N^{(0)}(i, j).$$

此外，A 的每条边长度至多为 ℓ_0。沿着从 i到 j的一条路径应用 (101)，然后对所有此类路径取下确界，可得

$$d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j) \le \kappa_0 d_N(i, j).$$

结合 (187)，我们得到

$$d_N(i, j) \le d_N^{(0)}(i, j) \le C_g d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j) \le C_g \kappa_0 d_N(i, j).$$

特别地,

$$B_N^{(0)}(i, R) \subseteq B_N(i, R) \subseteq B_N^{(0)}(i, C_g\kappa_0 R).$$

将 (188) 应用于 $B_N^{(0)}(i,\ C_g\kappa_0 R)$，并将 (189) 应用于 $B_N^{(0)}(i,\ R)$，可得

$$\begin{aligned}&\mu_N(B_N(i, R)) \le C(R + \delta)^m \quad (R > 0), \\ &\mu_N(B_N(i, R)) \ge cR^m \qquad\quad (\delta \le R \le R_0).\end{aligned} \tag{190}$$

这些估计在同一事件 Γ_N 上成立，并且对 (55) 中图参数的每一种选择同时成立。

关于 n和 C_ℓ的界定。固定 $2\delta \le h \le R_0$，并令 $Z = \{z_1, \dots, z_n\}$ 由 (53) 定义。根据构造，球 $B_N(z_\ell, h/2)$ 两两不相交，而球 $B_N(z_\ell, h)$ 覆盖所有顶点。应用 (190)，我们得到

$$nc(h/2)^m \le \sum_{\ell=1}^{n} \mu_N(B_N(z_\ell, h/2)) \le 1$$

and

$$1 \le \sum_{\ell=1}^{n} \mu_N(B_N(z_\ell, h)) \le nC(h+\delta)^m.$$

由于 $\delta \le h/2$，这些不等式给出 $n \asymp h^{-m}$。

对于首覆盖划分或Voronoi划分，我们有 $C_\ell \subseteq B_N(z_\ell,\ h)$。因此，由 (190) 得

$$w_\ell = \mu_N(C_\ell) \le \mu_N(B_N(z_\ell, h)) \le C(h+\delta)^m \le \frac{C'}{n}.$$

此外，对于每个 $i,\ j \in C_\ell$，

$$\begin{aligned} d_{\mathcal{M}}(x_i, x_j) &\le \kappa_0 d_N(i,j) \\ &\le \kappa_0 \big(d_N(i, z_\ell) + d_N(z_\ell, j)\big) \le 2\kappa_0 h. \end{aligned}$$

这就证明了 (56)。

对于Voronoi划分，我们还得到了 w_ℓ 的一个下界。若 $i \in B_N(z_\ell,\ h/2)$，则对每个 $j \ne \ell$，由 (53) 中的严格分离可得

$$\begin{aligned} d_N(i, z_j) &\ge d_N(z_\ell, z_j) - d_N(i, z_\ell) \\ &> h - d_N(i, z_\ell) \ge d_N(i, z_\ell). \end{aligned}$$

因此 $i \in C_\ell$，从而 $B_N(z_\ell,\ h/2) \subseteq C_\ell$。根据 (190)，

$$w_\ell \ge \mu_N(B_N(z_\ell, h/2)) \ge c(h/2)^m \ge \frac{c'}{n}.$$

最后，由 (52) 得到 $\pi_i = M_\ell^{-1}$（对 $i \in C_\ell$），这就证明了剩余的断言。 □

C.3 定理 4.3 和定理 4.4 的证明

定理 *4.3* 的证明。以 $\boldsymbol{X}$ 为条件，并令

$$\sigma_\ell^2 := \frac{1}{M_\ell} \sum_{i \in C_\ell} |f(x_i) - \bar{f}_\ell|^2.$$

根据命题 4.1，$f(x_{U_\ell})$ 的均值为 $\bar{f}_\ell$，方差为 σ_ℓ^2。由独立性可得

$$\mathbb{E}[\mathcal{S}_{\mathrm{bl}}(f) \mid \mathcal{X}] = \sum_{\ell=1}^{n} \bar{f}_\ell, \qquad \mathrm{Var}[\mathcal{S}_{\mathrm{bl}}(f) \mid \mathcal{X}] = \sum_{\ell=1}^{n} \sigma_\ell^2.$$

展开 C_ℓ 中的平方差，得到

$$\frac{1}{2M_\ell^2} \sum_{i,j \in C_\ell} |f(x_i) - f(x_j)|^2 = \frac{1}{M_\ell} \sum_{i \in C_\ell} f(x_i)^2 - \bar{f}_\ell^2 = \sigma_\ell^2. \tag{191}$$

对 (191) 求和即可证明 (57)。对于 $i,\ j \in C_\ell$，根据 Δ_ℓ 的定义可得

$$|f(x_i) - f(x_j)| \le [f]_{C^{0,s}} \Delta_\ell^s. \tag{192}$$

M_ℓ^2中有 C_ℓ^2个有序对，因此（57）给出（58）。在Γ_N上，（56）将 $\sum_\ell \Delta_\ell^{2s}$界定为$n($ $2\kappa_0 h)^{2s}$。除以 n^2并使用 $h \asymp n^{-1/m}$即可证明（59）。 □

定理 *4.4* 的证明。由（60），

$$\mathbb{E}[\widehat{I}_{\mathrm{bl}}(f)\mid\mathcal{X}]=\sum_{\ell=1}^{n}w_\ell\bar{f}_\ell=\frac{1}{N}\sum_{\ell=1}^{n}\sum_{i\in C_\ell}f(x_i)=I_N(f).$$

因此，条件均方误差为 $\sum_{\ell=1}^{n}w_\ell^2\sigma_\ell^2$，这是由 U_ℓ 的独立性得到的。在 (191) 中，因子 M_ℓ^{-2} 与 $w_\ell^2=M_\ell^2/N^2$ 中的 M_ℓ^2 抵消。由此得到 (61)，再应用 (192) 得到 (62)。在 Γ_N 上，我们有

$$\sum_{\ell=1}^{n}w_\ell^2\Delta_\ell^{2s}\le(2\kappa_0 h)^{2s}\max_\ell w_\ell\sum_{\ell=1}^{n}w_\ell\le C_s h^{2s}/n$$

由 (56) 和 $\sum_\ell w_\ell=1$ 得到。代入 $h\asymp n^{-1/m}$ 即可证明 (63)。 □

C.4 推论 4.5 的证明

证明。 定理 4.4 给出了每个点云上的条件无偏性。由于 f 在 $\widehat{\ }\mathcal{M}$ 上有界，且 $\sum_\ell w_\ell=1$，$I_{\mathrm{bl}}(f)$ 平方可积。因此，(45) 将推论中差值识别为 $\mathbb{E}[\mathrm{Var}(I_{\mathrm{bl}}(f)\mid\mathcal{X})]$。在 Γ_N 上，(56) 和 (63) 将此条件方差界定为 $C_s[f]_{C^{0,\ s}}^2h^{m+2s}$。在 Γ_N^c 上，我们仍有 $\Delta_\ell\le\mathrm{diam}(\mathcal{M})$ 和 $\sum_\ell w_\ell^2\le 1$。因此，(62) 将该处的条件方差界定为 $\frac{1}{2}[f]_{C^{0,\ s}}^2\mathrm{diam}(\mathcal{M})^{2s}$。取期望并利用 $\mathbb{P}(\Gamma_N^c)\le N^{-q}$ 即可证明该结论。 □

D 热核列的近似

在本附录中，矩阵范数和分解均相对于 $\mathbb{R}^N$ 和 $\mathbb{R}^n$ 上的标准欧几里得内积定义。

引理 D.1. 设 $T^{(q)}$ 和 q 由 (65)–(66) 定义。则

$$\|T^{(q)}-T_{h^2}\|_{\mathrm{op}}\le\eta,\qquad\|T^{(q)}E_Z-B_h\|_{\mathrm{op}}\le\eta.$$

证明。 对于 (65)，S 是对称的，且与一个随机矩阵相似。因此，其特征值属于 $[-1,1]$ 和 $\|S\|_{\mathrm{op}}\le 1$。由指数级数可得

$$\|T^{(q)}-T_{h^2}\|_{\mathrm{op}}\le e^{-u}\sum_{j=q+1}^{\infty}\frac{u^j}{j!}=\mathbb{P}(J_u\ge q+1).$$

对于 $v=q+1>u$，由 $e^\theta=v/u$ 和指数马尔可夫不等式可得

$$\mathbb{P}(J_u\ge v)\le e^{-u}(eu/v)^v\le(eu/v)^v.$$

选择 (66) 可确保 $v\ge 2eu$ 和 $v\ge 2\log(1/\eta)$。因此，最后一个表达式至多为 $2^{-v}\le\eta$。由于 $\|E_Z\|_{\mathrm{op}}=1$，引理中的第二个不等式得证。 □

命题 D.2。 假设定理 *3.3* 的结论成立，并令 $\widetilde{B}\in\mathbb{R}^{N\times n}$ 满足 $\|B-B_h\|_{\mathrm{op}}\le\eta$。记为 $\kappa=\sigma_{\min}(B_h)$。则

$$\kappa\ge c\sqrt{n/N}.\tag{193}$$

若 $\eta\le\kappa/2$，矩阵 $\widetilde{B}$ 的秩为 n，且投影 $\widetilde{\Pi}=\widetilde{B}(\widetilde{B}^*\widetilde{B})^{-1}\widetilde{B}^*$ 满足

$$\Delta:=\|\widetilde{\Pi}-\Pi_h\|_{\mathrm{op}}\le 4\eta/\kappa.\tag{194}$$

~若 $\Delta \le c_\pi n/(2N)$，其中 c_π 是（36）中的一个较小常数，则 $\widetilde{\pi}_i := \Pi_{ii} \ge c_\pi n/(2N)$。使用 *DPP* 的投影 Π及其自身权重 $\widetilde{\pi}_i$的~估计量（42）仍然无偏，并满足（44），但常数有所变化。

此外，对于 $\mathrm{osc}_{\mathcal{X}}(f) = \max_i f(x_i) - \min_i f(x_i)$,

$$\left|\mathrm{Var}_{\widetilde{\Pi}}[\mathcal{S}(f)] - \mathrm{Var}_{\Pi_h}[\mathcal{S}(f)]\right| \le \sqrt{2}\, n\Delta\, \mathrm{osc}_{\mathcal{X}}(f)^2. \tag{195}$$

特别地，对于固定的 $0 < s \le 1$，充分精度

$$\eta \le c\sqrt{n/N}\min\{n/N, h^{2s}\} \tag{196}$$

同时保持 (37)和(44)。

证明。回顾 (152) 中 U、 H 和 b_ℓ 的定义。令 $D_b = \mathrm{diag}(b_1, \ldots, b_n)$。由于 $B_h = UD_b^{1/2}$，我们有

$$B_h^* B_h = D_b^{1/2} H D_b^{1/2} \succeq \tfrac{1}{2} D_b \succeq \frac{c}{Nh^m} I \succeq \frac{c'n}{N} I.$$

~ ~这就证明了 (193)。此外，对于每个 $v \in \mathbb{R}^n$， $\|Bv\| \ge \|B_h v\| - \|($ $B - B_h)v\| \ge (\kappa - \eta)\|v\|$.~因此，只要 $\eta < \kappa$， B 的秩为 n。

~接下来证明 (194)。对于值域 Π 中的任意单位向量 w，写作 $w = Bv$, 其中$\|v\| \le (\kappa - \eta)^{-1}$。由于 $(I - \Pi_h)B_h = 0$，我们得到 $\|(I - \Pi_h)\widetilde{\Pi}\|_{\mathrm{op}} \le \eta/(\kappa - \eta)$。类似地，利用 $(I - \Pi)B = 0$ 和 $\sigma_{\min}(B_h) = \kappa$，我们有 $\|(I - \Pi)\Pi_h\|_{\mathrm{op}} \le \eta/\kappa$. 由于

$$\Pi_h - \widetilde{\Pi} = \Pi_h(I - \widetilde{\Pi}) - (I - \Pi_h)\widetilde{\Pi},$$

由此可得

$$\Delta \le \frac{\eta}{\kappa - \eta} + \frac{\eta}{\kappa} \le \frac{4\eta}{\kappa},$$

其中我们使用了 $\eta \le \kappa/2$。

对于每个 i，有

$$|\widetilde{\pi}_i - \pi_i| = |e_i^*(\widetilde{\Pi} - \Pi_h)e_i| \le \Delta.$$

因此，当 $2N$ 时，(36) 给出 $\widetilde{\pi}_i \ge c_\pi n/(2N)$。引理 B.12 和 (159)~随后确立了对于 Π 的条件无偏性和 (44)，其中常数可能有所不同。由 (170) 以及柯西–施瓦茨不等式，

$$\begin{aligned}\left|\mathrm{Var}_{\widetilde{\Pi}}[\mathcal{S}(f)] - \mathrm{Var}_{\Pi_h}[\mathcal{S}(f)]\right| &\le \frac{\mathrm{osc}_{\mathcal{X}}(f)^2}{2}\sum_{i,j}|\widetilde{\Pi}_{ij} - (\Pi_h)_{ij}||\widetilde{\Pi}_{ij} + (\Pi_h)_{ij}| \\ &\le \frac{\mathrm{osc}_{\mathcal{X}}(f)^2}{2}\|\widetilde{\Pi} - \Pi_h\|_{\mathrm{HS}}\|\widetilde{\Pi} + \Pi_h\|_{\mathrm{HS}}.\end{aligned}$$

由于两个投影的秩均为 n，我们有

$$\|\widetilde{\Pi} - \Pi_h\|_{\mathrm{HS}} \le \sqrt{2n}\,\Delta, \qquad \|\widetilde{\Pi} + \Pi_h\|_{\mathrm{HS}} \le 2\sqrt{n}.$$

代入这些估计即可证明 (195)。

最后，根据（193）和（194），将（196）中的常数选取得足够小，可确保

$$\Delta \le \frac{c_\pi n}{2N}, \qquad \Delta \le Ch^{2s}.$$

第一个不等式保持（44）成立，如上所示。此外，$\mathrm{osc}_{\mathcal{X}}(f) \le [f]_s\, x\mathrm{diam}(\mathcal{M})^s$，因此由（195）可得

$$\left|\mathrm{Var}_{\widetilde{\Pi}}[\mathcal{S}(f)] - \mathrm{Var}_{\Pi_h}[\mathcal{S}(f)]\right| \le C_s[f]_{s,\mathcal{X}}^2 nh^{2s}.$$

结合（37），即证明了最后一个断言。 □